

física cuántica

ÁTOMOS, MOLÉCULAS, SÓLIDOS,
NÚCLEOS Y PARTÍCULAS

Eisberg • Resnick

$$\Psi = \sum_K \Psi_K$$

$$\Psi = \sum_K \Psi_K$$

$$\Psi = \sum_K \Psi_K$$

$$\Psi = \sum_K \Psi_K$$

$$\Psi = \sum_K \Psi_K$$

 LIMUSA WILEY 

Contenido

Radiación térmica y el postulado de Planck 17

- 1-1 Introducción 19
- 1-2 Radiación térmica 19
- 1-3 Teoría clásica de la cavidad radiante 24
- 1-4 Teoría de Planck de la cavidad radiante 31
- 1-5 Aplicación de la ley de Planck de la radiación en termometría 38
- 1-6 El postulado de Planck y sus implicaciones 39
- 1-7 Breve historia del quantum 41

2

Fotones—Propiedades corpusculares de la radiación 45

- 2-1 Introducción 47
- 2-2 El efecto fotoeléctrico 47
- 2-3 Teoría cuántica de Einstein del efecto fotoeléctrico 50
- 2-4 El efecto Compton 55
- 2-5 Naturaleza dual de la radiación electromagnética 61
- 2-6 Fotones y emisión de rayos X 62
- 2-7 Producción y aniquilación de pares 65
- 2-8 Secciones transversales para absorción y dispersión de fotones 70

3

Postulado de de Broglie. Propiedades ondulatorias de las partículas 79

- 3-1 Ondas de materia 81
- 3-2 Dualidad onda-partícula 88
- 3-3 El principio de incertidumbre 91
- 3-4 Propiedades de las ondas de materia 95
- 3-5 Algunas consecuencias del principio de incertidumbre 105
- 3-6 Filosofía de la teoría cuántica 106

Modelo atómico de Bohr 113

4-1	Modelo de Thomson	115
4-2	Modelo de Rutherford	119
4-3	Estabilidad del átomo nuclear	126
4-4	Espectros atómicos	126
4-5	Postulados de Bohr	129
4-6	Modelo de Bohr	130
4-7	Corrección por masa nuclear finita	136
4-8	Estados de energía atómica	139
4-9	Interpretación de las reglas de cuantización	142
4-10	Modelo de Sommerfeld	146
4-11	El principio de correspondencia	149
4-12	Una crítica a la teoría cuántica antigua	151

5

Teoría de Schrödinger de la mecánica cuántica 157

5-1	Introducción	159
5-2	Argumentos de plausibilidad que conducen a la ecuación de Schrödinger	162
5-3	Interpretación de Born de las funciones de onda	169
5-4	Valores de expectación	176
5-5	La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo	187
5-6	Propiedades requeridas para las eigenfunciones	192
5-7	Cuantización de la energía en la teoría de Schrödinger	194
5-8	Resumen	203

6

Soluciones a las ecuaciones de Schrödinger independientes del tiempo 215

6-1	Introducción	217
6-2	El potencial cero	218
6-3	Potencial escalón (energía menor que la altura del escalón)	224
6-4	Potencial escalón (energía mayor que la altura del escalón)	234
6-5	La barrera de potencial	240
6-6	Ejemplos de penetración de barrera por partículas	247
6-7	Potencial de pozo cuadrado	251
6-8	Potencial de pozo cuadrado infinito	257
6-9	Potencial de oscilador armónico simple	265
6-10	Resumen	269

7

Átomos con un electrón 277

7-1	Introducción	279
7-2	Desarrollo de la ecuación de Schrödinger	280

7-3	Separación de la ecuación independiente del tiempo	282
7-4	Solución de las ecuaciones	284
7-5	Eigenvalores, números cuánticos y degeneración	286
7-6	Eigenfunciones	289
7-7	Densidades de probabilidad	292
7-8	Impulso angular orbital	303
7-9	Ecuaciones de eigenvalores	308

8

Momentos magnéticos dipolares, spin y razones de transición 315

8-1	Introducción	317
8-2	Momentos magnéticos dipolares orbitales	317
8-3	Experimento de Stern-Gerlach y spin del electrón	322
8-4	Interacción spin-órbita	328
8-5	Momento angular total	331
8-6	Energía de interacción spin-órbita y niveles de energía del hidrógeno	335
8-7	Razones de transición y reglas de selección	340
8-8	Comparación entre las teorías cuánticas antigua y moderna	347

9

Átomos multielectrónicos-estados base y excitaciones de rayos X 353

9-1	Introducción	355
9-2	Partículas idénticas	356
9-3	El principio de exclusión	362
9-4	El átomo de helio y las fuerzas de intercambio	365
9-5	Teoría de Hartree	374
9-6	Resultados de la teoría de Hartree	378
9-7	Estados base de átomos multielectrónicos y la tabla periódica	385
9-8	Espectros de líneas de rayos X	393

10

Átomos multielectrónicos-excitaciones ópticas 405

10-1	Introducción	407
10-2	Átomos alcalinos	408
10-3	Átomos con varios electrones ópticamente activos	412
10-4	Acoplamiento LS	416
10-5	Niveles de energía del átomo de carbono	422
10-6	El efecto Zeeman	425
10-7	Resumen	432

II

Estadística cuántica 437

- 11-1 Introducción 439
- 11-2 Indistinguibilidad y estadística cuántica 440
- 11-3 Funciones de distribución cuánticas 444
- 11-4 Comparación de las funciones de distribución 447
- 11-5 Calor específico de un sólido cristalino 452
- 11-6 La distribución de Boltzmann como una aproximación a las distribuciones cuánticas 456
- 11-7 El laser 457
- 11-8 Gas de fotones 463
- 11-9 Gas de fonones 464
- 11-10 Condensación de Bose y Helio líquido 465
- 11-11 El gas de electrones libres 471
- 11-12 Potencial de contacto y emisión termiónica 474
- 11-13 Descripciones clásica y cuántica del estado de un sistema 476

12

Moléculas 483

- 12-1 Introducción 485
- 12-2 Enlaces iónicos 485
- 12-3 Enlaces covalentes 488
- 12-4 Espectros moleculares 492
- 12-5 Espectros rotacionales 493
- 12-6 Espectros vibro-rotacionales 496
- 12-7 Espectros electrónicos 500
- 12-8 El efecto Raman 503
- 12-9 Determinación del spin nuclear y características de simetría 504

13

Sólidos—Conductores y semiconductores 513

- 13-1 Introducción 515
- 13-2 Tipos de sólidos 515
- 13-3 Teoría de bandas de los sólidos 517
- 13-4 Conducción eléctrica en metales 522
- 13-5 Modelo cuántico del electrón libre 524
- 13-6 Movimiento de electrones en una red periódica 530
- 13-7 Masa efectiva 534
- 13-8 Semiconductores 538
- 13-9 Dispositivos semiconductores 544

14

Sólidos—Superconductores y propiedades magnéticas 555

- 14-1 Superconductividad 557
- 14-2 Propiedades magnéticas de sólidos 566
- 14-3 Paramagnetismo 567
- 14-4 Ferromagnetismo 571
- 14-5 Antiferromagnetismo y ferrimagnetismo 577

15

Modelos nucleares 583

- 15-1 Introducción 585
- 15-2 Generalidades sobre algunas propiedades nucleares 587
- 15-3 Dimensiones y densidades nucleares 591
- 15-4 Masas nucleares y sus abundancias 595
- 15-5 Modelo de gota 604
- 15-6 Números mágicos 607
- 15-7 Modelo del gas de Fermi 609
- 15-8 Modelo de capas 612
- 15-9 Predicciones del modelo de capas 618
- 15-10 Modelo colectivo 622
- 15-11 Resumen 628

16

Decaimiento nuclear y reacciones nucleares 633

- 16-1 Introducción 635
- 16-2 Decaimiento Alfa 635
- 16-3 Decaimiento Beta 642
- 16-4 Interacción por decaimiento Beta 653
- 16-5 Decaimiento Gamma 660
- 16-6 El efecto Mössbauer 666
- 16-7 Reacciones nucleares 669
- 16-8 Estados excitados de los núcleos 679
- 16-9 Fisión y reactores 683
- 16-10 Fusión y origen de los elementos 688

17

Partículas elementales 699

- 17-1 Introducción 701
- 17-2 Fuerzas nucleónicas 701
- 17-3 Isospín 715
- 17-4 Piones 717
- 17-5 Muones 725
- 17-6 Extrañeza 727

17-7	Interacciones fundamentales y leyes de conservación	732
17-8	Familias de partículas elementales	736
17-9	Hipercarga y Cuarks	739
	Apéndice A	
	Teoría especial de la relatividad	749
	Apéndice B	
	Radiación de una carga acelerada	769
	Apéndice C	
	Distribución de Boltzmann	773
	Apéndice D	
	Trayectorias en la dispersión de Rutherford	781
	Apéndice E	
	Cantidades complejas	785
	Apéndice F	
	Solución numérica de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para un potencial de pozo cuadrado	789
	Apéndice G	
	Solución analítica de la ecuación de Schrödinger independiente el tiempo para un potencial de pozo cuadrado	795
	Apéndice H	
	Solución en serie de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para un potencial de oscilador armónico simple	801
	Apéndice I	
	El laplaciano y los operadores de impulso angular en coordenadas polares esféricas	807
	Apéndice J	
	La precesión de Thomas	811

Apéndice K	
El principio de exclusión en el acoplamiento <i>LS</i>	815
Apéndice L	
Referencias	819
Apéndice M	
Respuestas a problemas seleccionados	821
Apéndice N	
Constantes usuales y factores de conversión	823
Indice	825

Radiación térmica y el postulado de Planck

1.1	Introducción	19
	Teoría cuántica antigua; relación entre la física cuántica y la clásica; papel de la constante de Planck.	
1.2	Radiación térmica	19
	Propiedades de la radiación térmica, cuerpos negros; radiancia espectral; funciones de distribución; radiancia; ley de Stefan; constante de Stefan-Boltzmann; ley de Wien; radiación por una cavidad; densidad de energía; ley de Kirchhoff.	
1.3	Teoría clásica de la cavidad radiante	24
	Ondas electromagnéticas en una cavidad; ondas estacionarias; conteo de las frecuencias permitidas; equipartición de la energía; constante de Boltzmann; espectro de Rayleigh-Jeans.	
1.4	Teoría de Planck de la cavidad radiante	31
	Distribución de Boltzmann; energías discretas; violación de la equipartición; constante de Planck; espectro de Planck.	
1.5	Aplicación de la ley de radiación de Planck en termometría	38
	Pirómetros ópticos; radiación universal a 3°K y la "gran explosión".	
1.6	El postulado de Planck y sus implicaciones	39
	Definición general del postulado; energías cuantizadas; estados cuánticos; números cuánticos; péndulo macroscópico.	

1.7 Breve historia del quantum 41

Trabajo inicial de Planck; intentos de reconciliar la cuantización con la física clásica.

Preguntas 41

Problemas 43

Radiación térmica y el postulado de Planck

1.1 Introducción

En una reunión de la Sociedad Alemana de Física, el 14 de diciembre de 1900, Max Planck leyó un trabajo intitulado "La teoría de la ley de distribución de energías del espectro normal". Este trabajo que en un principio atrajo poca atención, fue el precursor de una revolución en la física. La fecha de su presentación se considera como el nacimiento de la física cuántica, a pesar de que fue hasta un cuarto de siglo después, cuando Schrödinger y otros desarrollaron la mecánica cuántica moderna, base del conocimiento actual. Fueron muchos los caminos que convergieron en este conocimiento, cada uno de los cuales mostró distintos aspectos de las fallas de la física clásica. En éste y los siguientes capítulos se examinarán los logros más importantes de la que hoy se llama *teoría cuántica antigua* y que dio origen a la mecánica cuántica moderna. Los fenómenos experimentales que se analizarán en relación con la teoría cuántica antigua, comprenden todas las disciplinas de la física clásica: mecánica, termodinámica, mecánica estadística y electromagnetismo. La necesidad de una mecánica cuántica, se manifestará por la contradicción sistemática de las leyes clásicas respecto a dichos fenómenos y la solución a esos conflictos en base a ideas cuánticas. El estudio de la teoría cuántica antigua permitirá obtener, más fácilmente, un conocimiento más profundo de la mecánica cuántica cuando se inicie su consideración en el quinto capítulo.

Como en el caso de la relatividad (que se trata brevemente en el apéndice A), la física cuántica representa una generalización de la física clásica, que incluye a las leyes clásicas como casos particulares. Así como la relatividad extiende el campo de aplicación de las leyes de la física a la región de altas velocidades, la física cuántica lo extiende a la región de dimensiones pequeñas; y así como la relatividad se caracteriza por una constante universal de significado fundamental, la velocidad de la luz c , así mismo la física cuántica se caracteriza por una constante universal de significado fundamental, que hoy se llama constante de Planck h . En su trabajo de 1900, Planck introdujo esta constante para tratar de explicar las propiedades observadas en la radiación térmica. De esta manera se empezará el estudio de la radiación térmica, que conducirá a la constante de Planck y, relacionada con ésta, al concepto cuántico de energía discreta. También se verá que la radiación térmica en sí, es de gran importancia y actualidad, ya que, por ejemplo, este fenómeno ha ayudado recientemente a los astrofísicos a decidir entre varias teorías acerca del origen del universo.

1.2 Radiación térmica

Se llama *radiación térmica*, a la radiación emitida por un cuerpo como consecuencia de su temperatura. Todos los cuerpos emiten esta radiación a su alrededor, y la absorben de él. Si, en

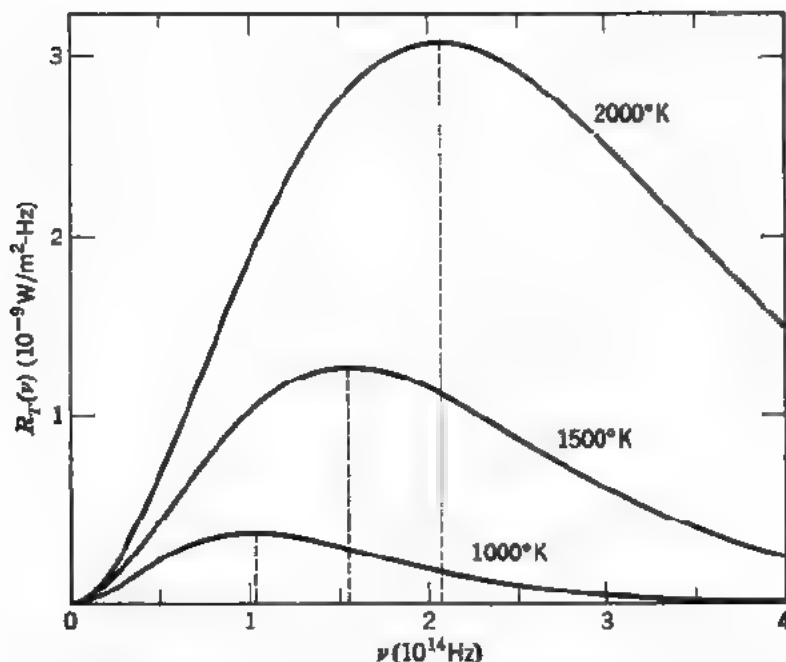
un principio, el cuerpo está más caliente que su alrededor, se enfriará, ya que la rapidez con que emite energía excederá la rapidez con que la absorbe. Cuando se alcanza el equilibrio térmico la rapidez de emisión y la de absorción de energía serán iguales. La materia en un estado condensado (es decir, sólido o líquido) emite un espectro de radiación continuo. Los detalles del espectro son casi independientes del material particular del cual se compone el cuerpo, pero dependen fuertemente de la temperatura. A temperaturas ordinarias, la mayoría de los cuerpos son visibles no por la luz que emiten sino por la luz que reflejan, ya que si no se hace incidir luz sobre ellos no es posible verlos. Sin embargo, a muy altas temperaturas, los cuerpos son luminosos por sí mismos. En un cuarto oscuro se les puede ver brillar; pero aún a temperaturas de varios miles de grados Kelvin, más del 90% de la radiación térmica emitida es invisible para nosotros, empezando por la parte correspondiente al infrarrojo del espectro electromagnético. Por lo tanto, los cuerpos luminosos por sí mismos están muy calientes.

Por ejemplo, considere el calentamiento en el fuego, de una barra de hierro a temperaturas cada vez más altas, retirando en forma periódica la barra del fuego, el tiempo suficiente para observar sus propiedades. Cuando la barra aún está a temperaturas relativamente bajas, radia calor pero no está visiblemente caliente; conforme aumenta la temperatura, la cantidad de radiación emitida por la barra aumenta muy rápidamente y empiezan a notarse efectos visibles. La barra empieza a verse de un color rojo opaco, después adquiere un color rojo brillante y, a muy altas temperaturas, un intenso color blanco azulado. Es decir, a medida que aumenta la temperatura, el cuerpo emite más radiación térmica y la frecuencia de la radiación más intensa se vuelve cada vez mayor.

La relación que existe entre la temperatura de un cuerpo y el espectro de frecuencias de la radiación emitida, se utiliza en un dispositivo llamado pirómetro óptico. Este dispositivo es esencialmente un espectrómetro rudimentario que permite al operador estimar la temperatura de un cuerpo caliente, como una estrella, observando el color o la composición de frecuencias de la radiación térmica que emite. Existe un espectro continuo de radiación emitida, pero el ojo humano ve principalmente el color correspondiente a la emisión más intensa en la región visible. El sol, los filamentos de focos y carbones calientes, son ejemplos comunes de objetos que emiten radiación visible.

En términos generales, la forma detallada del espectro de radiación térmica emitida por un cuerpo caliente, depende de la composición del mismo. Sin embargo, experimentalmente se encuentra que solo hay una clase de cuerpos que emiten espectros térmicos de características universales. Estos son los llamados *cuerpos negros*, es decir, cuerpos cuyas superficies absorben toda la radiación térmica que incide sobre ellos. El nombre resulta apropiado puesto que dichos cuerpos no reflejan luz y, por tanto, se ven negros. Un ejemplo de un (casi) cuerpo negro, sería *cualquier* objeto cubierto con una capa difusa de pigmento negro, como negro-bismuto o negro-humo. Más adelante se describió otro ejemplo bastante diferente. Independientemente de los detalles de su composición, *todos* los cuerpos negros a la misma temperatura emiten radiación térmica con el mismo espectro. Este hecho general se puede entender en base a argumentos clásicos que implican el equilibrio termodinámico. Sin embargo, la forma específica del espectro no puede obtenerse solamente de argumentos termodinámicos. Las propiedades universales de la radiación emitida por cuerpos negros los hacen objeto de un interés teórico especial y los físicos siempre trataron de encontrar una explicación a las características específicas de su espectro.

La distribución espectral de la radiación de un cuerpo negro se especifica por la cantidad $R_T(\nu)$, llamada *radiancia espectral*, definida tal que $R_T(\nu) d\nu$ es igual a la energía emitida en forma de radiación con frecuencias en el intervalo entre ν y $\nu + d\nu$ de un área unitaria de la superficie a temperatura absoluta T y por unidad de tiempo. En 1899, Lummer y Pringsheim realizaron una de las primeras mediciones precisas de esta cantidad. Utilizaron un instrumento esencialmente similar a los espectrómetros de prisma utilizados para medir espectros ópticos, excepto que para los prismas, lentes, etc, se utilizaron materiales especiales, de manera que

**FIGURA 1-1**

Radiancia espectral de un cuerpo negro radiante como función de la frecuencia de radiación, para temperaturas de 1000°K y 2000°K del cuerpo radiante. Obsérvese que la frecuencia a la que ocurre la máxima radiancia (línea punteada), aumenta linealmente conforme la temperatura aumenta y que la potencia total emitida, por metro cuadrado del cuerpo radiante (área bajo la curva), aumenta muy rápidamente con la temperatura.

fueran transparentes a la radiación térmica de frecuencia relativamente baja. En la figura 1-1 se indica la dependencia de $R_T(\nu)$ con T y ν que se observa en los experimentos.

Las *funciones de distribución*, de las cuales es un ejemplo, la radiancia espectral son muy comunes en física. Así por ejemplo, la función de distribución de velocidades de Maxwell (que se parece a una de las curvas de la figura 1-1) nos dice cómo se distribuyen las moléculas de un gas a presión y temperatura fijas, de acuerdo con su velocidad. Otra función de distribución, que probablemente el estudiante ha visto, es la que especifica el tiempo de decaimiento de núcleos radiactivos (que tiene la forma de una exponencial decreciente) en una muestra que contiene núcleos de una especie dada, y desde luego habrá visto la función de distribución correspondiente a las calificaciones obtenidas en un examen de física.

La función de distribución para la radiancia espectral de un cuerpo negro de área dada y a una temperatura particular, sea 1000°K de la figura 1-1, muestra que: (1) la potencia emitida por un intervalo de frecuencias pequeño $d\nu$, es pequeña si ese intervalo se encuentra a una frecuencia ν muy pequeña comparada con 10^{14} Hz. La potencia es cero para ν igual a cero. (2) La potencia radiada en el intervalo $d\nu$ aumenta rápidamente a medida que ν aumenta, partiendo de valores muy pequeños. (3) Alcanza un máximo para un valor de $\nu \simeq 1.1 \times 10^{14}$ Hz. Es decir, la potencia radiada con mayor intensidad, ocurre a esa frecuencia. (4) Por arriba de $\simeq 1.1 \times 10^{14}$ Hz, la potencia radiada disminuye lenta pero continuamente conforme ν aumenta. Se vuelve cero una vez más, cuando ν tiende a valores infinitamente grandes.

Las dos funciones de distribución, correspondientes a las temperaturas de 1500°K y 2000°K, que aparecen en la figura, muestran que; (5) la frecuencia para la cual la potencia radiada ocurre con mayor intensidad, aumenta, conforme la temperatura aumenta. Por inspección de la figura se puede verificar que esta frecuencia aumenta linealmente con la temperatura (6) La potencia total radiada, en todas las frecuencias, aumenta conforme la temperatura aumenta, pero más rápidamente que en forma lineal. La potencia total radiada a una temperatura particular, se obtiene sencillamente del área bajo la curva correspondiente a esa temperatura. $\int_0^\infty R_T(\nu) d\nu$, ya que $R_T(\nu)d\nu$ es la potencia radiada en el intervalo de frecuencias comprendido entre ν y $\nu + d\nu$

La integral de la radiancia espectral $R_T(\nu)$ sobre toda ν , es la energía total emitida de un cuerpo negro a temperatura T , por unidad de tiempo y por unidad de área. Se le llama la *radiancia* R_T , es decir,

$$R_T = \int_0^\infty R_T(\nu) d\nu \quad (1-1)$$

Como se mencionó en el estudio relacionado con la figura 1-1, R_T aumentaría rápidamente a medida que la temperatura aumenta. El resultado se conoce como ley de Stefan, y fue enunciada por primera vez en 1879, en forma de una ecuación empírica:

$$R_T = \sigma T^4 \quad (1-2)$$

donde

$$\sigma = 5.67 \times 10^{-8} \text{ W/m}^2\text{-}^\circ\text{K}^4$$

es llamada *constante de Stefan-Boltzmann*. En la figura 1-1 también se muestra que el espectro se desplaza hacia frecuencias mayores a medida que T aumenta. Este resultado se conoce como *ley del desplazamiento de Wien*:

$$\nu_{\text{máx}} \propto T \quad (1-3a)$$

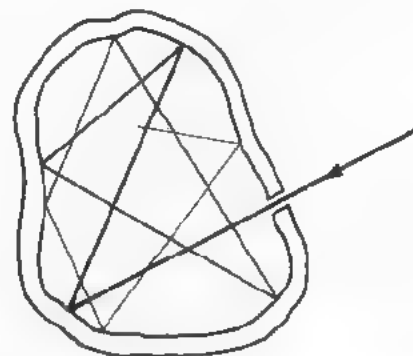
donde $\nu_{\text{máx}}$ es la frecuencia para la cual $R_T(\nu)$ alcanza su valor máximo para una T particular. A medida que T aumenta, $\nu_{\text{máx}}$ se desplaza hacia frecuencias mayores. Todos estos resultados concuerdan con las experiencias ya conocidas que se analizaron anteriormente, a saber; que la radiación térmica emitida aumenta rápidamente con la temperatura, (la barra de hierro radia mucha más energía térmica a temperaturas más altas), y la frecuencia principal de la radiación también aumenta, conforme la temperatura aumenta (la barra cambia de color, de rojo opaco a blanco azulado).

Otro ejemplo de un cuerpo negro, que como se verá resulta particularmente importante, consiste en un objeto que contiene una cavidad y que se comunica con el exterior por medio de un pequeño agujero como se muestra en la figura 1-2. La radiación del exterior que incide sobre el agujero, penetra en la cavidad y se refleja hacia todos sentidos en las paredes de la cavidad, de modo que eventualmente se absorbe en estas paredes. Si el área del agujero es muy pequeña, comparada con el área de la superficie interna de la cavidad, la radiación reflejada hacia el exterior a través del agujero será despreciable. Esencialmente, toda la radiación que incide sobre el agujero será absorbida, por lo tanto, el *agujero* tendrá todas las propiedades de la superficie de un cuerpo negro. La mayoría de los cuerpos negros que se utilizan en los experimentos de laboratorio, se construyen a lo largo de estas líneas.

Supóngase que las paredes de la cavidad se calientan a una temperatura T , de modo que

FIGURA 1-2

Cavidad en un cuerpo comunicada con el exterior por medio de un pequeño agujero. La radiación incidente sobre el agujero es absorbida completamente después de reflexiones sucesivas en las paredes internas de la cavidad. El agujero absorbe radiación como un cuerpo negro. En el proceso inverso, por medio del cual la radiación que sale por el agujero se constituye por contribuciones emitidas de la superficie interna, el agujero emite radiación como un cuerpo negro.



emitirán radiación térmica que llenará la cavidad. Una pequeña fracción de esta radiación, que incide en el agujero, pasará por él, y así el agujero actuará como emisor de radiación térmica. Como el agujero debe tener las propiedades de la superficie de un cuerpo negro, la radiación que emite debe tener el espectro de un cuerpo negro; sin embargo, como el agujero simplemente muestrea la radiación térmica dentro de la cavidad, resulta evidente que la radiación en la cavidad también debe tener un espectro de cuerpo negro. De hecho, debe tener un espectro de cuerpo negro característico de la temperatura T en las paredes, ya que ésta es la única temperatura que se define en el sistema. El espectro emitido por el agujero en la cavidad, se especifica en términos del flujo de energía $R_T(\nu)$. Sin embargo, resulta más útil especificar el espectro de la radiación dentro de la cavidad, llamada *radiación de la cavidad*, en términos de una *densidad de energía*, $\rho_T(\nu)$, que se define como la energía contenida en una unidad de volumen de la cavidad a temperatura T , en el intervalo de frecuencia entre ν y $\nu + d\nu$. Es evidente que estas cantidades deben ser proporcionales entre sí, es decir,

$$\rho_T(\nu) \propto R_T(\nu) \quad (1-4)$$

Por lo tanto, la radiación dentro de una cavidad cuyas paredes están a temperatura T , tiene el mismo carácter que la radiación emitida por la superficie de un cuerpo negro a temperatura T . Experimentalmente, resulta conveniente producir un espectro de cuerpo negro, por medio de una cavidad en un cuerpo caliente con un agujero hacia el exterior, y teóricamente también es conveniente estudiar la radiación de un cuerpo negro, analizando la radiación de una cavidad, ya que es posible aplicar argumentos muy generales para predecir las propiedades de la radiación de una cavidad.

Ejemplo 1-1. (a) Ya que $\nu = c$, la velocidad constante de la luz, la ley del desplazamiento de Wien (1-3a), también se puede escribir como:

$$\lambda_{\max} T = \text{constante} \quad (1-3b)$$

donde λ_{\max} es la longitud de onda para la cual, a una temperatura T particular, la radiancia espectral alcanza su valor máximo. El valor determinado experimentalmente para la constante de Wien es $2.898 \times 10^{-3} \text{ m}^\circ\text{K}$. Si se supone que las superficies de las estrellas se comportan como cuerpos negros, se puede obtener una buena estimación de su temperatura, midiendo λ_{\max} . Para el sol, $\lambda_{\max} = 5100 \text{ Å}$, mientras que para la estrella polar $\lambda_{\max} = 3500 \text{ Å}$. Encuentre la temperatura de la superficie de estas estrellas. (Un *angstrom* $= 1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m}$.)

Para el sol, $T = 2.898 \times 10^{-3} \text{ m}^\circ\text{K} / 5100 \times 10^{-10} \text{ m} = 5700^\circ\text{K}$. Para la estrella polar, $T = 2.898 \times 10^{-3} \text{ m}^\circ\text{K} / 3500 \times 10^{-10} \text{ m} = 8300^\circ\text{K}$.

A 5700°K , la superficie del sol está a una temperatura muy cercana a la necesaria para que la mayor parte de su radiación esté en la región visible del espectro. Lo anterior sugiere que durante las etapas de la evolución humana, nuestros ojos se han adaptado al sol, haciéndose más sensibles a aquellas longitudes de onda que emite con mayor intensidad.

b) Utilizando la ley de Stefan, (1-2), y las temperaturas recién obtenidas; determinar la potencia radiada por 1 cm^2 de superficie estelar.

Para el sol,

$$\begin{aligned} R_T &= \sigma T^4 = 5.67 \times 10^{-8} \text{ W/m}^2\text{-}^\circ\text{K}^4 \times (5700^\circ\text{K})^4 \\ &= 5.90 \times 10^7 \text{ W/m}^2 \simeq 6000 \text{ W/cm}^2 \end{aligned}$$

Para la estrella polar,

$$\begin{aligned} R_T &= \sigma T^4 = 5.67 \times 10^{-8} \text{ W/m}^2\text{-}^\circ\text{K}^4 \times (8300^\circ\text{K})^4 \\ &= 2.71 \times 10^9 \text{ W/m}^2 \simeq 27,000 \text{ W/cm}^2 \end{aligned}$$

Ejemplo 1-2. Suponga que se tienen dos cuerpos opacos, separados por una distancia grande y colgados de hilos finos en una cámara evacuada cuyas paredes se mantienen a temperatura constante. En tales condiciones, los cuerpos y las paredes intercambian calor sólo por medio de radiación. Sea e la razón de emisión de energía radiante de un cuerpo y sea a la razón de absorción de energía radiante del cuerpo. Demuestre que en equilibrio

$$\frac{e_1}{a_1} = \frac{e_2}{a_2} = 1 \quad (1-5)$$

Esta relación, (1-5), se conoce como *ley de radiación de Kirchhoff*. En todo el sistema dentro de la cámara y en tal estado, la razón de emisión necesariamente es igual a la razón de absorción para cada cuerpo. Entonces:

$$e_1 = a_1 \quad \text{y} \quad e_2 = a_2$$

Por lo tanto,

$$\frac{e_1}{a_1} = 1 = \frac{e_2}{a_2}$$

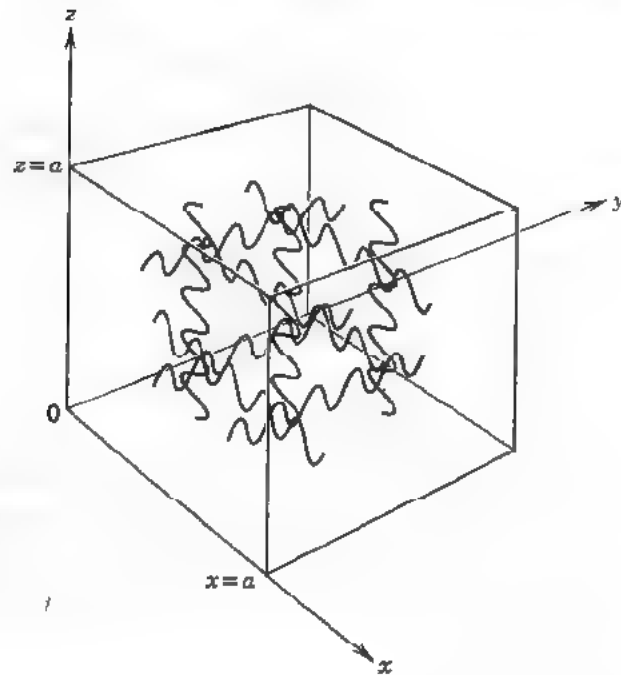
Si uno de los cuerpos, por ejemplo el cuerpo 2, es un cuerpo negro, entonces $a_2 > a_1$, ya que un cuerpo negro es más absorbente que uno que no es cuerpo negro. Por lo tanto, de (1-5) se sigue que $e_2 > e_1$. Así pues, el hecho observado de que cuerpos que son más absorbentes también son buenos emisores, se predice por la ley de Kirchhoff. ◀

1.3 Teoría clásica de la cavidad radiante

A principios del presente siglo, Rayleigh y también Jeans, hicieron cálculos de la densidad de energía de la radiación por una cavidad (o cuerpo negro), que señalaban hacia un serio conflicto entre la física clásica y los resultados experimentales. Este cálculo es similar a los que resultaron de considerar muchos otros fenómenos (es decir, el calor específico de los sólidos) que serán tratados más adelante. Los detalles serán presentados aquí, pero primero se describirán los procedimientos generales que servirán como guía en los cálculos.

Considérese que a una cavidad con paredes metálicas se la calienta uniformemente a una temperatura T . Las paredes emiten radiación electromagnética en el intervalo térmico de frecuencias. Se sabe que esto ocurre, básicamente, por el movimiento acelerado de los electrones en las paredes, que resulta de la agitación térmica (véase el apéndice B). Sin embargo, no es necesario estudiar en detalle el comportamiento de las ondas electromagnéticas en el interior de la cavidad. Rayleigh y Jeans procedieron en la forma siguiente. En primer lugar, se utiliza la teoría electromagnética clásica para demostrar que la radiación en el interior de la cavidad debe existir en forma de ondas estacionarias con nodos en las superficies metálicas. Utilizando argumentos geométricos, se cuenta el número de dichas ondas estacionarias en el intervalo de frecuencias entre ν y $\nu + d\nu$, con el fin de determinar cómo depende ese número de ν . Después, se utiliza un resultado de la teoría cinética para calcular la energía total promedio de estas ondas cuando el sistema está en equilibrio térmico. En la teoría clásica, la energía total promedio sólo depende de la temperatura T . El número de ondas estacionarias en el intervalo de frecuencias, multiplicado por la energía promedio de las ondas y dividido entre el volumen de la cavidad, proporciona el contenido de energía promedio por unidad de volumen en el intervalo de frecuencias entre ν y $\nu + d\nu$, y esta es la cantidad que se buscaba: la densidad de energía $\rho_T(\nu)$. Ahora, haga todo esto.

Por simplicidad, supóngase que la cavidad de paredes metálicas llena con radiación electromagnética tiene la forma de un cubo de lado a , como se muestra en la figura 1-3. En ese caso, la radiación que se refleja de las paredes puede ser analizada en términos de tres componentes a lo

**FIGURA 1-3**

Cavidad con paredes metálicas llena con radiación electromagnética, mostrando las tres componentes de la radiación sin interferirse, que rebotan de las paredes y que forman ondas estacionarias con nodos en cada pared.

largo de las tres direcciones mutuamente perpendiculares que definen los lados de la cavidad. Como las paredes opuestas son paralelas entre sí, las tres componentes de la radiación no se mezclan y se pueden tratar por separado. Considérese la componente x en la pared metálica en $x = 0$. Toda la radiación que incide sobre esta pared es reflejada y las ondas incidentes y reflejadas se combinan para formar una onda estacionaria. Ahora bien, como la radiación electromagnética es una vibración transversal con el vector de campo eléctrico \mathbf{E} perpendicular a la dirección de propagación, y como la dirección de propagación para este componente es perpendicular a la pared en cuestión, el vector de campo eléctrico \mathbf{E} es paralelo a la pared. Sin embargo, una pared metálica no es compatible con un campo eléctrico paralelo a su superficie, ya que siempre se puede establecer un flujo de cargas de modo tal que se neutralice el campo. Por lo tanto para esta componente, \mathbf{E} siempre es cero en la pared. Es decir, la onda estacionaria asociada con la componente x de la radiación, debe tener un nodo (amplitud cero) en $x = 0$. La onda estacionaria también deberá tener un nodo en $x = a$, ya que no puede haber un campo eléctrico paralelo en la pared correspondiente. Además, se aplican condiciones similares a las otras dos componentes; la onda estacionaria asociada con la componente y deberá tener nodos en $y = 0$ y $y = a$, y la onda estacionaria asociada con la componente z , deberá tener nodos en $z = 0$ y $z = a$. Estas condiciones imponen limitaciones en las longitudes de onda posibles y por lo tanto, en las frecuencias posibles de la radiación electromagnética en la cavidad.

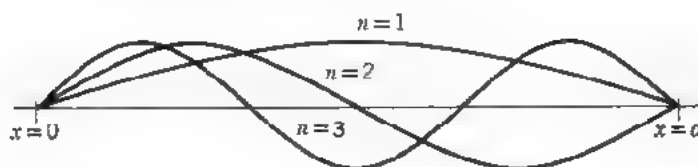
Ahora se considerará el problema de contar el número de ondas estacionarias con nodos en las superficies de la cavidad, cuyas longitudes de onda se encuentran en el intervalo entre λ y $\lambda + d\lambda$, correspondiente al intervalo de frecuencias entre ν y $\nu + d\nu$. Primero se tratará la componente x , solamente para fijar la atención en las ideas contenidas en este cálculo; es decir, se tratará el caso simplificado, aunque artificial, de una "cavidad unidimensional" de longitud a . Al desarrollar este caso, se verá que la generalización al caso real tridimensional es obvio.

El campo eléctrico para una onda estacionaria unidimensional puede describirse matemáticamente por la función

$$E(x, t) = E_0 \sin(2\pi x/\lambda) \sin(2\pi \nu t) \quad (1-6)$$

donde λ es la longitud de onda, ν la frecuencia y E_0 la amplitud máxima de la onda. Las dos primeras cantidades se relacionan entre sí por medio de la ecuación

$$\nu = c/\lambda \quad (1-7)$$

**FIGURA 1-4**

Patrones de amplitud para ondas estacionarias en una cavidad unidimensional con paredes en $x = 0$ y $x = a$, para los tres primeros valores del índice n .

donde c es la velocidad de propagación de las ondas electromagnéticas. La ecuación (1-6) representa una onda cuya amplitud varía en el espacio como $\sin(2\pi x/\lambda)$ y que oscila en el tiempo con frecuencia ν como un oscilador armónico simple. Puesto que obviamente, la amplitud será igual a cero en todo tiempo para las posiciones que satisfagan la relación

$$2x/\lambda = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (1-8)$$

la onda tendrá nodos fijos en ellas, esto es, es una onda estacionaria. Para poder satisfacer el requisito de que las ondas tengan nodos en los extremos de la cavidad unidimensional se escoge el origen del eje x en uno de los extremos de la cavidad ($x = 0$) y se exige que en el otro extremo ($x = a$)

$$2x/\lambda = n \quad \text{para } x = a \quad (1-9)$$

donde

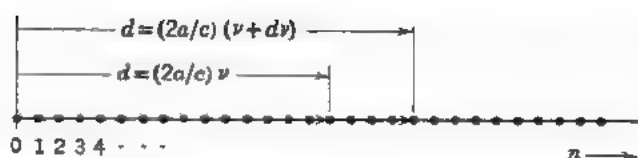
$$n = 1, 2, 3, 4, \dots$$

Esta condición determina el conjunto de valores permitidos de la longitud de onda. Para estos valores permitidos, las amplitudes de las ondas estacionarias siguen un patrón cuya apariencia se muestra en la figura 1-4. Estos patrones se pueden reconocer como los correspondientes a ondas estacionarias producidas por las vibraciones de una cuerda sujeta en sus extremos, sistema físico real que también satisface (1-6). En nuestro caso, el patrón representa ondas electromagnéticas estacionarias.

Por conveniencia, la discusión se continúa en términos de frecuencias permitidas en lugar de longitudes de onda permitidas. Estas frecuencias son $\nu = c/\lambda$, donde $2a/\lambda = n$. Es decir,

$$\nu = cn/2a \quad n = 1, 2, 3, 4, \dots \quad (1-10)$$

Estos valores permitidos de la frecuencia pueden representarse por un diagrama que consiste de un eje sobre el cual se señalan puntos correspondientes a cada valor entero de n . En dicho diagrama, el valor permitido de la frecuencia ν , correspondiente a un valor particular de n , de acuerdo con (1-10), es igual a $c/2a$ veces la distancia d del origen al punto respectivo, o también, la distancia d es $2a/c$ veces la frecuencia ν . Estas relaciones se muestran en la figura 1-5. Dichos diagramas resultan útiles en el cálculo del número de valores permitidos de la frecuencia ν en el intervalo de ν a $\nu + d\nu$, que se denota por $N(\nu) d\nu$. Para evaluar esta cantidad, simplemente se cuenta el número de puntos sobre el eje n que se encuentran entre dos límites que se construyen de manera tal que correspondan a las frecuencias ν y $\nu + d\nu$, respectivamente, como los puntos se distribuyen uniformemente en el eje n , aparentemente el número de puntos comprendidos entre estos dos límites será proporcional a $d\nu$ pero no dependerá de ν . En realidad, fácilmente se ve que $N(\nu) d\nu = (2a/c) d\nu$. Sin embargo, lo anterior debe multiplicarse por un factor de 2, ya que, para cada frecuencia permitida, existen en realidad dos ondas independientes correspon-

**FIGURA 1-5**

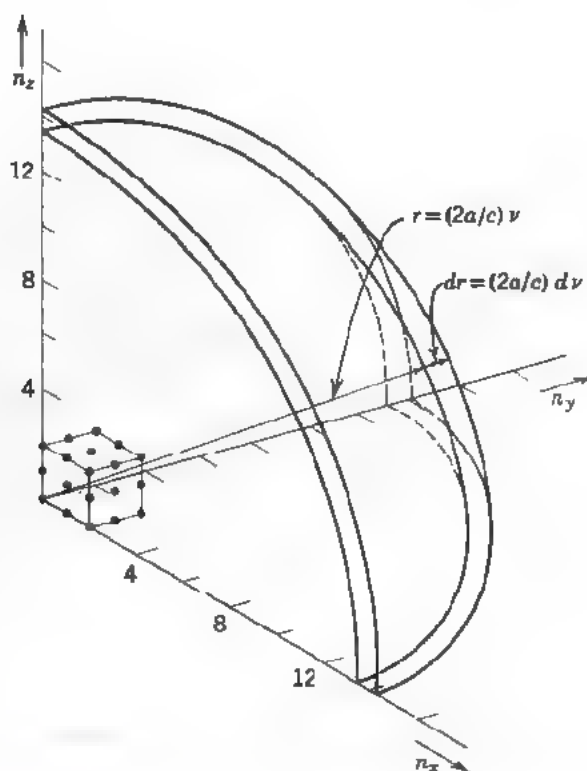
Valores permitidos del índice n , que determina los valores permitidos de la frecuencia, en una cavidad unidimensional de longitud a .

dientes a los dos estados de polarización posibles de las ondas electromagnéticas. Por lo tanto, se tiene que

$$N(\nu) d\nu = \frac{4a}{c} d\nu \quad (1-11)$$

De esta manera se completa el cálculo del número de ondas estacionarias permitidas para el caso artificial de una cavidad unidimensional.

El cálculo anterior hace evidente los procedimientos para extender el cálculo al caso real de una cavidad tridimensional. Esta extensión se indica en la figura 1-6. En este caso, el conjunto de puntos uniformemente distribuidos en valores enteros a lo largo del eje n , se sustituye por un arreglo tridimensional uniforme de puntos cuyas tres coordenadas corresponden a valores enteros a lo largo de tres ejes n mutuamente perpendiculares. Cada punto del arreglo corresponde a una onda estacionaria tridimensional particular permitida. El número de nodos de las componentes x, y, z de la onda estacionaria, se obtienen de los valores enteros n_x y n_y , equivale a analizar una onda tridimensional (es decir, que se propaga en una dirección arbitraria) en tres componentes tridimensionales. En este caso, el número de frecuencias permitidas en el intervalo de frecuencia de ν a $\nu + d\nu$ es igual al número de puntos contenidos entre dos cascarones esféricos con radios correspondientes a las frecuencias ν y $\nu + d\nu$ respectivamente.

**FIGURA 1-6**

Los valores permitidos de la frecuencia en una cavidad tridimensional cúbica de lado a , se determinan por tres índices n_x, n_y, n_z que sólo pueden tomar valores enteros. Para mayor claridad, se muestran sólo unos cuantos de los muchos puntos correspondientes a conjuntos de estos tres índices

Lo anterior será proporcional al volumen entre estos dos cascarones esféricos, ya que los puntos se distribuyen uniformemente. Por lo tanto, se puede ver que $N(\nu) d\nu$ será proporcional a $\nu^2 d\nu$, ya que el factor ν^2 es proporcional al área de los cascarones y el segundo factor $d\nu$, es proporcional a la distancia entre ellos. En el ejemplo siguiente, se analizarán los detalles y se encontrará que

$$N(\nu) d\nu = \frac{8\pi V}{c^3} \nu^2 d\nu \quad (1-12)$$

donde $V = a^3$, el volumen de la cavidad.

Ejemplo 1-3. Derivar (1-12), que da el número de ondas electromagnéticas estacionarias permitidas, en cada intervalo de frecuencias, para el caso de una cavidad tridimensional cúbica de paredes metálicas de lado a .

Considérese radiación de longitud de onda λ y frecuencia $\nu = c/\lambda$, que se propaga en una dirección definida por los ángulos α, β, γ , como se muestra en la figura 1-7. La radiación debe ser una onda estacionaria ya que sus tres componentes son ondas estacionarias. La posición de algunos de los nodos fijos de esta onda estacionaria, se indica por un conjunto de planos perpendiculares a la dirección de propagación α, β, γ . La distancia entre estos planos nodales de la radiación, es justamente $\lambda/2$, donde λ es su longitud de onda. Se indica también la posición de los tres ejes de los nodos de las tres componentes.

Las distancias entre estos nodos es:

$$\begin{aligned} \lambda_x/2 &= \lambda/2 \cos \alpha \\ \lambda_y/2 &= \lambda/2 \cos \beta \\ \lambda_z/2 &= \lambda/2 \cos \gamma \end{aligned} \quad (1-13)$$

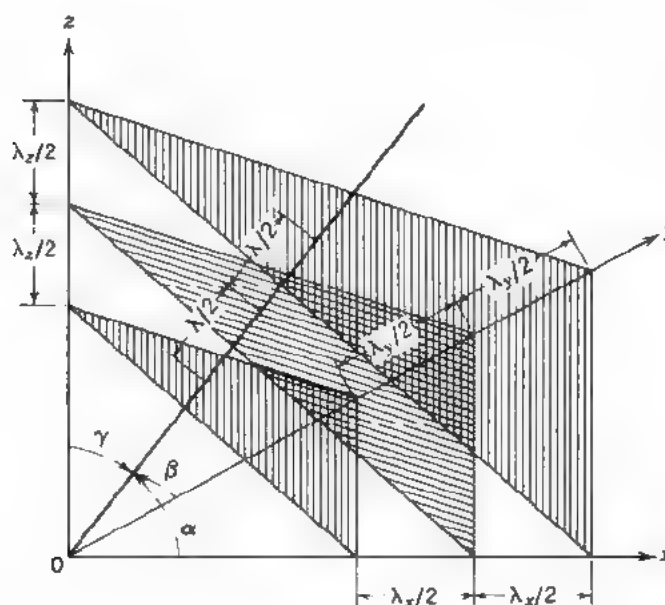


FIGURA 1-7

Planos nodales de una onda estacionaria propagándose en determinada dirección en una cavidad cúbica

Las expresiones para las magnitudes de los campos eléctricos de las tres componentes en los tres ejes, se pueden escribir como,

$$E(x, t) = E_{0x} \sin(2\pi x/\lambda_x) \sin(2\pi \nu t)$$

$$E(y, t) = E_{0y} \sin(2\pi y/\lambda_y) \sin(2\pi \nu t)$$

$$E(z, t) = E_{0z} \sin(2\pi z/\lambda_z) \sin(2\pi \nu t)$$

La expresión para la componente x representa una onda con amplitud máxima E_{0x} con una variación en el espacio $\sin(2\pi x/\lambda_x)$ y que oscila con una frecuencia ν . Como el $\sin(2\pi x/\lambda_x)$ es cero para $2x/\lambda_x = 0, 1, 2, 3, \dots$, la onda es estacionaria con longitud de onda λ_x ya que tiene nodos fijos separados una distancia $\Delta x = \lambda_x/2$. Las expresiones para las componentes y y z representan ondas estacionarias de amplitudes máximas E_{0y} , E_{0z} y longitudes de onda λ_y y λ_z pero las tres ondas estacionarias componentes oscilan con la frecuencia ν de la radiación. Obsérvese que las tres expresiones satisfacen automáticamente el requisito de que la componente x tenga un nodo en $x = 0$, la componente y tenga un nodo en $y = 0$, y la componente z tenga un nodo en $z = 0$. Para que satisfagan el requisito de que la componente x tenga un nodo en $x = a$, la componente y tenga un nodo en $y = a$, y la componente z tenga un nodo en $z = a$ se hace:

$$2a/\lambda_x = n_x \quad \text{para } x = a$$

$$2y/\lambda_y = n_y \quad \text{para } y = a$$

$$2z/\lambda_z = n_z \quad \text{para } z = a$$

donde $n_x = 1, 2, 3, \dots$; $n_y = 1, 2, 3, \dots$; $n_z = 1, 2, 3, \dots$. Usando (1-13), estas condiciones se transforman en:

$$(2a/\lambda) \cos \alpha = n_x \quad (2a/\lambda) \cos \beta = n_y \quad (2a/\lambda) \cos \gamma = n_z$$

Elevando al cuadrado ambos miembros de estas ecuaciones y sumando, se obtiene

$$(2a/\lambda)^2 (\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta + \cos^2 \gamma) = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$$

pero los ángulos α, β, γ tienen la propiedad

$$\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta + \cos^2 \gamma = 1$$

Por lo tanto,

$$2a/\lambda = \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}$$

donde n_x, n_y, n_z , toman todos los valores enteros posibles, esta ecuación describe la limitación en las longitudes de onda posibles de la radiación electromagnética contenida en la cavidad.

Una vez más, la discusión se continúa en términos de las frecuencias permitidas, en lugar de las longitudes de onda permitidas, que son

$$\nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{c}{2a} \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2} \quad (1-14a)$$

Enseguida, se contarán el número de frecuencias permitidas en un intervalo de frecuencias dado, construyendo una red cúbica uniforme en un octante de un sistema de coordenadas rectangulares, de modo tal, que las tres coordenadas de cada punto de la red son iguales a un conjunto posible de los tres enteros n_x, n_y y n_z , (ver la figura 1-6). Por construcción, cada punto de la red corresponde a una frecuencia permitida. Además, el número de frecuencias permitidas entre ν y $\nu + d\nu$, $N(\nu) d\nu$, es igual número de puntos contenidos entre cascarones esféricos concéntricos de radios r y $r + dr$, $N(r) dr$, donde

$$r = \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}$$

De (1-14a), esto es

$$r = \frac{2a}{c} \nu \quad (1-14b)$$

Como $N(r) dr$ es igual al volumen comprendido entre los cascarones por la densidad de puntos de la red, y como, por construcción, la densidad es uno, $N(r) dr$ es simplemente,

$$N(r) dr = \frac{1}{8} 4\pi r^2 dr = \frac{\pi r^2 dr}{2} \quad (1-15)$$

Igualando lo anterior a $N(\nu) d\nu$, y evaluando $r^2 dr$ de (1-14b), se tiene

$$N(\nu) d\nu = \frac{\pi}{2} \left(\frac{2a}{c} \right)^3 \nu^2 d\nu$$

Para completar el cálculo, estos resultados se deben multiplicar por un factor de 2, ya que, para cada una de las frecuencias permitidas que se han enumerado, existen en realidad dos ondas independientes correspondientes a los dos estados de polarización posibles de la radiación electromagnética. Por lo tanto, se ha derivado (1-12). Se puede demostrar que $N(\nu)$ es independiente de la forma de la cavidad y sólo depende de su volumen.

Obsérvese que existe una diferencia significativa entre los resultados obtenidos para el caso real de una cavidad tridimensional y los resultados obtenidos antes para el caso artificial de una cavidad unidimensional. El factor ν^2 que se encuentra en (1-12) pero no en (1-11), jugará un papel muy importante, como se verá, en los argumentos siguientes. Básicamente, este factor resulta del hecho de que vivimos en un mundo tridimensional siendo la potencia de ν uno menos que la dimensionalidad. Aunque Planck, al resolver finalmente las serias discrepancias entre la teoría clásica y el experimento, puso en tela de juicio algunos puntos que habían sido considerados obviamente ciertos, ni él ni otros trabajando sobre el problema dudaron de (1-12). Existió y aún persiste un acuerdo general de que (1-12) es válida.

Ahora ya se puede contar el número de ondas estacionarias. El paso siguiente en la teoría clásica de Rayleigh-Jeans para la radiación de un cuerpo negro, es el cálculo de la energía total promedio contenida en cada onda estacionaria de frecuencia ν . De acuerdo con la física clásica, la energía de alguna onda particular puede tener cualquier valor entre cero e infinito y su valor real debe ser proporcional al cuadrado de su amplitud constante E_0 . Sin embargo, para un sistema que contenga un número grande de entes físicos del mismo tipo, los cuales están en equilibrio térmico a una temperatura T , la física clásica hace una predicción bastante definitiva acerca de los valores *promedio* de las energías de los entes. Esto puede aplicarse en este caso, puesto que la multitud de ondas estacionarias, que constituyen la radiación térmica dentro de la cavidad, son entes del mismo tipo que están en equilibrio térmico entre sí, a la temperatura T de las paredes de la cavidad. El equilibrio térmico se asegura por el hecho de que las paredes de una cavidad real siempre absorberán y rerradiarán, con diferentes frecuencias y direcciones, una pequeña parte de la radiación que incide sobre ellas, y consecuentemente, las diferentes ondas estacionarias en forma gradual, podrán intercambiar energía como se requiere para mantener el equilibrio.

La predicción viene de la teoría cinética clásica, y es llamada *ley de equipartición de la energía*. Esta ley afirma que para un sistema de moléculas de un gas, en equilibrio térmico a una temperatura T , la energía cinética promedio de una molécula, por grado de libertad, es $kT/2$, donde $k = 1.38 \times 10^{-23}$ joule/°K se le llama *constante de Boltzmann*. Esta ley se aplica a cualquier sistema clásico que contenga, en equilibrio, un número grande de entes del mismo tipo. Para el caso que nos ocupa, los entes son ondas estacionarias que tienen como único grado de libertad, las amplitudes de sus campos eléctricos. Por lo tanto, sus energías cinéticas, en promedio, tendrán el mismo valor, $kT/2$. Sin embargo, cada onda estacionaria oscilante senoidal tiene una energía *total* que es el doble de su energía cinética promedio. Esta es una propiedad común a todos los sistemas que tienen un solo grado de libertad y que llevan a cabo oscilaciones armónicas simples en el tiempo; casos conocidos son un péndulo o un resorte. Por lo tanto, de

acuerdo con la ley clásica de la equipartición, cada onda estacionaria en la cavidad tiene una energía total promedio

$$\bar{\mathcal{E}} = kT \quad (1-16)$$

El punto más importante que debe notarse, es que se predice la misma energía total promedio $\bar{\mathcal{E}}$, para todas las ondas estacionarias en la cavidad, independientemente de sus frecuencias.

La energía por unidad de volumen en el intervalo de frecuencias entre ν y $\nu + d\nu$ del espectro de cuerpo negro de una cavidad a temperatura T , es simplemente el producto de la energía promedio de cada onda estacionaria, por el número de ondas estacionarias en el intervalo de frecuencias dividido entre el volumen de la cavidad. Finalmente, de (1-15) y (1-16) se obtiene el resultado,

$$\rho_T(\nu) d\nu = \frac{8\pi\nu^2 kT}{c^3} d\nu \quad (1-17)$$

Esta es la *fórmula de Rayleigh-Jeans, para la radiación de un cuerpo negro*.

En la figura 1-8 se comparan las predicciones de esta fórmula con los resultados experimentales. La discrepancia es evidente. En el límite de frecuencias bajas, el espectro clásico se aproxima a los resultados experimentales, pero, a medida que la frecuencia crece, la predicción teórica tiende a infinito. Los experimentos demuestran que la densidad de energía siempre permanece finita, como obviamente debe ser, y de hecho, la densidad de energía tiende a cero para frecuencias muy altas. Este comportamiento tan grotescamente irreal de la teoría clásica a altas frecuencias es conocido en física como la "catástrofe ultravioleta". Este término es sugestivo de la importancia de la falla de la teoría.

1.4 Teoría de Planck de la cavidad radiante

Tratando de resolver la discrepancia entre teoría y experimento, Planck llegó a considerar la posibilidad de que se violara la ley de equipartición de la energía en que se basaba la teoría. De la

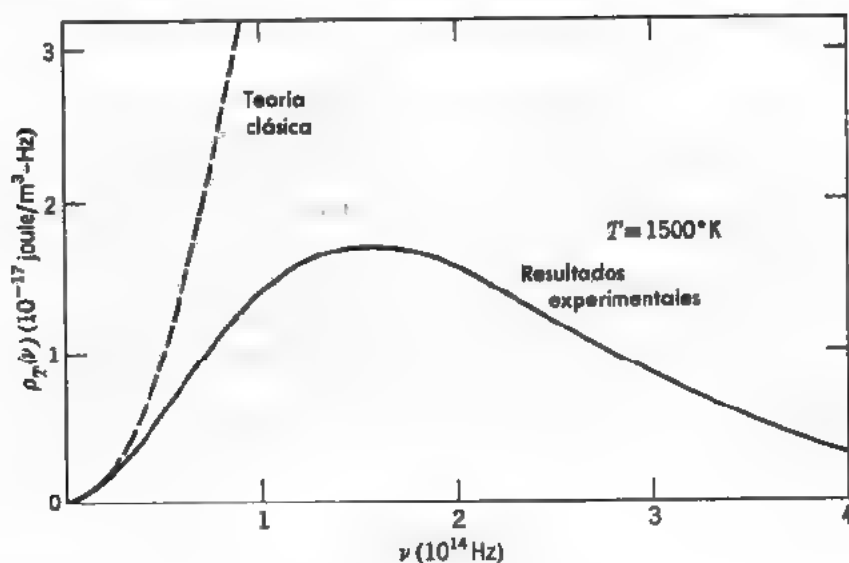


FIGURA 1-8

Predicción de Rayleigh-Jeans (línea punteada) comparada con los resultados experimentales (línea continua) para la densidad de energía en una cavidad-cuerpo negro que muestra la seria discrepancia llamada catástrofe ultravioleta.

figura 1-8 resulta evidente que la ley proporciona resultados satisfactorios a bajas frecuencias. Por lo tanto se puede suponer

$$\bar{\mathcal{E}} \xrightarrow{\nu \rightarrow 0} kT \quad (1-18)$$

Es decir, la energía total promedio tiende a T a medida que la frecuencia tiende a cero. La discrepancia a frecuencias altas se elimina si, por alguna razón, existe un corte, de modo que

$$\bar{\mathcal{E}} \xrightarrow{\nu \rightarrow \infty} 0 \quad (1-19)$$

es decir, si la energía total promedio tiende a cero cuando la frecuencia tiende a infinito. En otras palabras, Planck pensó que, dadas las circunstancias que prevalecen en el caso de la radiación del cuerpo negro, la energía promedio de una onda estacionaria es función de la frecuencia $\bar{\mathcal{E}}(\nu)$ con las propiedades indicadas por (1-18) y (1-19). Esto contrasta con la ley de equipartición de la energía que asigna a la energía promedio $\bar{\mathcal{E}}$ un valor independiente de la frecuencia.

Veamos el origen de la ley de equipartición. Básicamente surge de un resultado mucho más completo de la teoría cinética clásica llamado distribución de Boltzmann. (En el apéndice C se dan los argumentos que conducen a la distribución de Boltzmann, para aquellos estudiantes que no estén familiarizados con ella.) Aquí se utilizará una forma especial de la distribución de Boltzmann

$$P(\mathcal{E}) = \frac{e^{-\mathcal{E}/kT}}{kT} \quad (1-20)$$

en la que $P(\mathcal{E}) d\mathcal{E}$ es la probabilidad de encontrar un ente dado de un sistema, con energía en el intervalo entre \mathcal{E} y $\mathcal{E} + d\mathcal{E}$, cuando el número de estados de energía para el ente en ese intervalo, es independiente de \mathcal{E} . Se supone que el sistema contiene un número grande de entes del mismo tipo, en equilibrio térmico a temperatura T , y k representa la constante de Boltzmann. La ecuación (1-20) gobierna las energías de los entes del sistema que se están considerando, a saber, un conjunto de ondas estacionarias que oscilan de modo armónico simple.

La función de distribución de Boltzmann está íntimamente relacionada con la función de distribución de Maxwell para la energía de una molécula en un sistema de moléculas en equilibrio térmico. De hecho, la exponencial en la función de distribución de Boltzmann es responsable por el factor exponencial en la distribución de Maxwell. Algunos estudiantes sabrán que existe un factor $\mathcal{E}^{1/2}$ presente en la distribución de Maxwell, que resulta por la circunstancia de que el número de estados de energía para una molécula en el intervalo entre \mathcal{E} y $\mathcal{E} + d\mathcal{E}$ no es independiente de \mathcal{E} , sino que aumenta en proporción a $\mathcal{E}^{1/2}$.

La función de distribución de Boltzmann proporciona una información completa acerca de las energías de los entes del sistema, incluyendo desde luego, el valor promedio de las energías $\bar{\mathcal{E}}$. Esta última cantidad puede obtenerse usando (1-20) para $P(\mathcal{E})$ y evaluando las integrales en el cociente:

$$\bar{\mathcal{E}} = \frac{\int_0^{\infty} \mathcal{E} P(\mathcal{E}) d\mathcal{E}}{\int_0^{\infty} P(\mathcal{E}) d\mathcal{E}} \quad (1-21)$$

El integrando en el numerador es la energía \mathcal{E} , pesada por la probabilidad de que el ente se encontrará con esta energía. La energía promedio se obtiene integrando sobre todos los valores posibles de la energía. El denominador es la probabilidad de encontrar al ente con *cualquier* energía y por lo tanto deberá tener el valor uno; que lo tiene. La integral en el numerador puede evaluarse, y el resultado es justamente la ley de equipartición de la energía

$$\bar{\mathcal{E}} = kT \quad (1-22)$$

En lugar de llevar a cabo la evaluación, resultará más conveniente, por los argumentos siguientes, examinar la representación gráfica de $P(\mathcal{E})$ y $\bar{\mathcal{E}}$ que se muestran en la parte superior de la figura 1-9. Se grafica $P(\mathcal{E})$ como función de \mathcal{E} . Su valor máximo, $1/kT$, ocurre en $\mathcal{E} = 0$ y el valor de $P(\mathcal{E})$ decrece suavemente a medida que \mathcal{E} aumenta y tiende a cero cuando $\mathcal{E} \rightarrow \infty$. Es decir, el valor que es más probable que se encontrará en una medida de \mathcal{E} , será cero. Pero el promedio $\bar{\mathcal{E}}$ de los resultados que se encontrarían en cierto número de medidas de \mathcal{E} es mayor que cero. La evaluación de $\bar{\mathcal{E}}$ a partir de $P(\mathcal{E})$, se indica en la mitad inferior de la figura 1-9.

La gran contribución de Planck surgió cuando pudo darse cuenta que podía lograr el corte requerido, indicado en (1-19), si modificaba el cálculo que conduce a $\bar{\mathcal{E}}$ a partir de $P(\mathcal{E})$, tratando la energía \mathcal{E} como si fuera una *variable discreta* en lugar de la *variable continua* que definitivamente es desde el punto de vista de la física clásica. Esto puede hacerse, cuantitativamente, si se vuelve a escribir (1-21) en términos de sumas en lugar de integrales. Pronto se verá

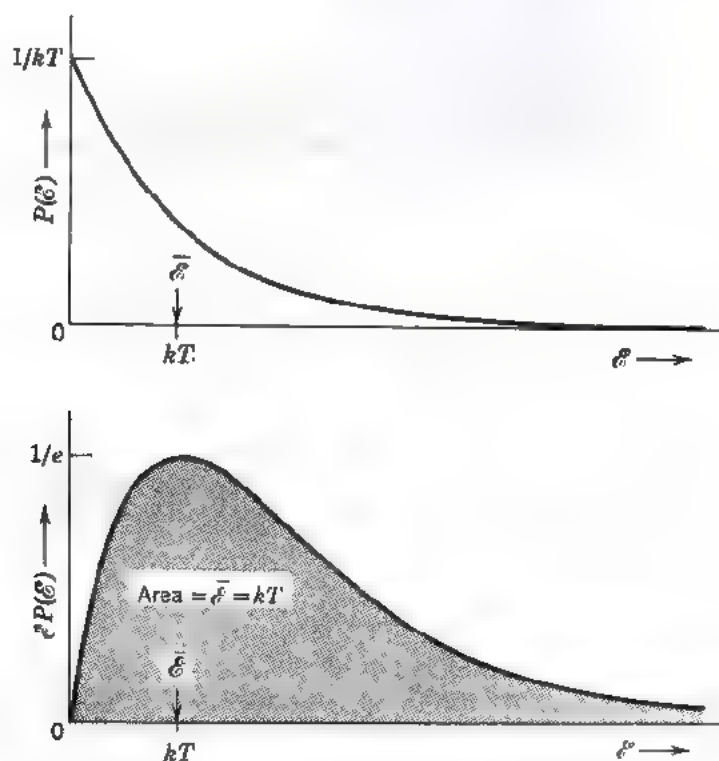


FIGURA 1-9

Arriba: Gráfica de la distribución de probabilidad de Boltzmann $P(\mathcal{E}) = e^{-\mathcal{E}/kT}/kT$. El valor promedio de la energía \mathcal{E} para esta distribución es $\bar{\mathcal{E}} = kT$, que corresponde a la ley clásica de la equipartición de la energía. Para calcular este valor de $\bar{\mathcal{E}}$, se integra $\mathcal{E}P(\mathcal{E})$ de cero a infinito. Esto es justamente la cantidad que se está promediando, \mathcal{E} , multiplicada por la probabilidad relativa $P(\mathcal{E})$ de que el valor de \mathcal{E} sea encontrado en una medida de la energía. *Abajo:* Gráfica de $\mathcal{E}P(\mathcal{E})$. El área bajo esta curva proporciona el valor de $\bar{\mathcal{E}}$.

que esto no es difícil de hacer, pero es más instructivo estudiar primero, la representación gráfica en la figura 1-10.

Planck supuso que la energía \mathcal{E} podía tomar sólo ciertos valores discretos, en lugar de cualquier valor, y que los valores discretos de la energía estaban uniformemente distribuidos; es decir, tomó

$$\mathcal{E} = 0, \Delta\mathcal{E}, 2\Delta\mathcal{E}, 3\Delta\mathcal{E}, 4\Delta\mathcal{E}, \dots \quad (1-23)$$

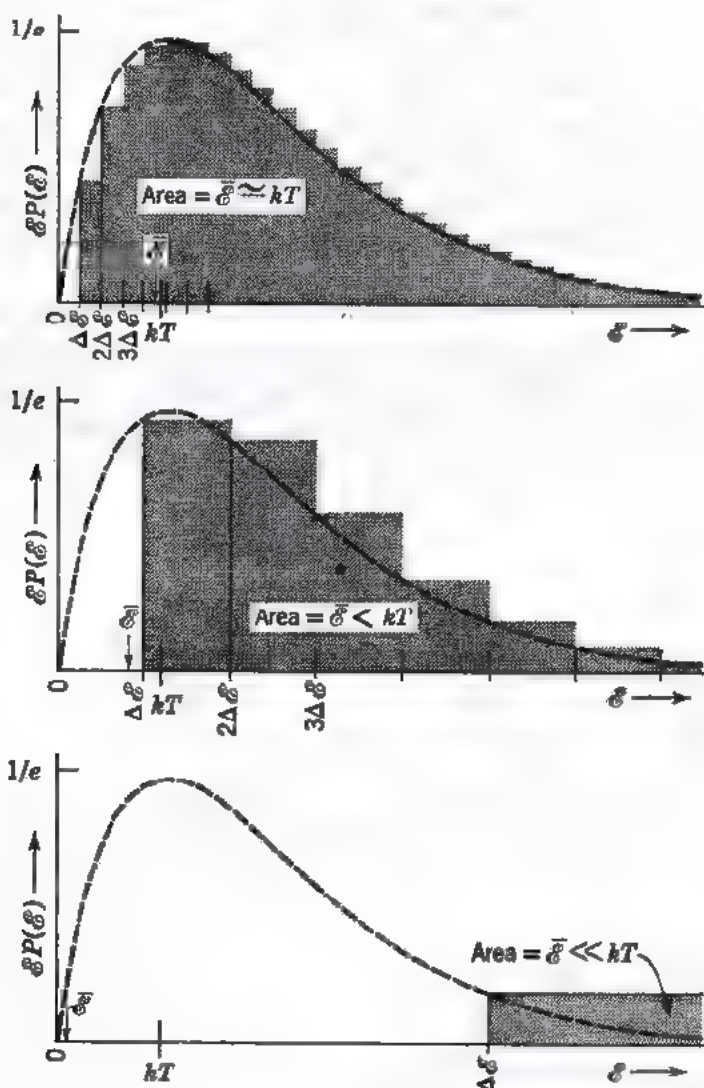


FIGURA 1-10

Arriba. Si la energía \mathcal{E} no es una variable continua, sino que está restringida a valores $0, \Delta\mathcal{E}, 2\Delta\mathcal{E}, 3\Delta\mathcal{E}, \dots$, como se indica por las divisiones en el eje \mathcal{E} de la figura, se debe cambiar la integral usada para calcular el valor promedio $\bar{\mathcal{E}}$ por una suma. El valor promedio es la suma de las áreas de los rectángulos, de amplitud $\Delta\mathcal{E}$, y con alturas dadas por los valores permitidos de \mathcal{E} por $P(\mathcal{E})$ al principiar cada intervalo. En la figura $\Delta\mathcal{E} \ll kT$, y por tanto, las energías permitidas están muy próximas entre sí y, consecuentemente, el área de los rectángulos difiere muy poco del área bajo la curva continua. Por lo tanto, el valor promedio $\bar{\mathcal{E}}$ es casi igual a kT , el valor encontrado en la figura 1-9. *Centro:* $\Delta\mathcal{E} \simeq kT$, y $\bar{\mathcal{E}}$ tiene un valor menor que el que tiene en el caso de arriba. *Abajo:* $\Delta\mathcal{E} \gg kT$, y $\bar{\mathcal{E}}$ es aún menos. En las tres figuras, los rectángulos muestran la contribución de $\mathcal{E}P(\mathcal{E})$ al área total, para cada energía permitida. El rectángulo para $\mathcal{E} = 0$ es, desde luego, siempre de altura cero. Esto produce un gran efecto en el área total, si las amplitudes de los rectángulos son grandes.

como el conjunto de valores permitidos de la energía. El intervalo uniforme entre valores sucesivos de la energía, es en este caso $\Delta\mathcal{E}$. En la parte superior de la figura 1-10, se ilustra una evaluación de $\bar{\mathcal{E}}$ a partir de $P(\mathcal{E})$, para un caso en el que $\Delta\mathcal{E} \ll kT$. En este caso el resultado que se obtiene es $\bar{\mathcal{E}} \simeq kT$. Es decir, el valor que aquí se obtiene es esencialmente el mismo que el resultado clásico, ya que, los valores discretos $\Delta\mathcal{E}$ son muy pequeños comparados con el intervalo de energías kT , en el cual $P(\mathcal{E})$ cambia significativamente; esencialmente, en este caso es indiferente si la energía \mathcal{E} es discreta o continua. En la parte media de la figura 1-10, se ilustra el caso para $\Delta\mathcal{E} \simeq kT$. Aquí se encuentra que $\bar{\mathcal{E}} < kT$, ya que la mayoría de los entes tienen energía $\mathcal{E} = 0$, puesto que $P(\mathcal{E})$ tiene un valor pequeño para el primer valor permitido de $\Delta\mathcal{E}$ diferente de cero, de modo que el valor $\mathcal{E} = 0$ es dominante en el cálculo del valor promedio de \mathcal{E} y el resultado que se obtiene es más pequeño. Sin embargo, en la parte inferior de la figura 1-10, donde se muestra el caso para $\Delta\mathcal{E} \gg kT$, se aprecia más claramente el efecto de tomar valores discretos. Para este caso, la probabilidad de encontrar un ente con una de las energías permitidas mayores que cero es despreciable, ya que, $P(\mathcal{E})$ es extremadamente pequeña para todos estos valores, y el resultado que se obtiene es $\bar{\mathcal{E}} \ll kT$.

Resumiendo, Planck descubrió que podía obtener $\bar{\mathcal{E}} \simeq kT$ cuando la diferencia entre energías adyacentes, $\Delta\mathcal{E}$, es pequeña y $\bar{\mathcal{E}} \simeq 0$, cuando $\Delta\mathcal{E}$ es grande. Como requería el primer resultado para valores pequeños de ν , y el segundo resultado para valores grandes de ν , obviamente era necesario que $\Delta\mathcal{E}$ fuese una función creciente de ν . Por trabajo numérico, encontró que podía tomar la relación más simple posible entre $\Delta\mathcal{E}$ y ν , que tuviera esta propiedad. Es decir, supuso que estas cantidades fueran proporcionales

$$\Delta\mathcal{E} \propto \nu \quad (1-24)$$

Escrita como una ecuación en lugar de una proporcionalidad, se tiene:

$$\Delta\mathcal{E} = h\nu \quad (1-25)$$

donde h es la constante de proporcionalidad.

Mediante trabajo numérico, Planck determinó el valor de esta constante, de modo que se obtuviera el mejor ajuste entre su teoría y los valores experimentales. El valor que obtuvo fue muy cercano al que es aceptado en la actualidad:

$$h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ joule-seg}$$

Esta constante famosa, ahora se llama *constante de Planck*.

La fórmula que obtuvo Planck para $\bar{\mathcal{E}}$, evaluando la suma análoga a la integral en (1-21), y que se obtendrá en el ejemplo 1-4, es

$$\bar{\mathcal{E}}(\nu) = \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1} \quad (1-26)$$

Ya que $e^{h\nu/kT} \rightarrow 1 + h\nu/kT$ para $h\nu/kT \rightarrow 0$, se tiene que $\bar{\mathcal{E}}(\nu) \rightarrow kT$ en este límite, como se predice en (1-18). En el límite $h\nu/kT \rightarrow \infty$, $e^{h\nu/kT} \rightarrow \infty$, y $\bar{\mathcal{E}}(\nu) \rightarrow 0$, en concordancia con la predicción de (1-19).

La fórmula que se obtiene inmediatamente para la densidad de energía en el espectro del cuerpo negro, utilizando el resultado para $\bar{\mathcal{E}}(\nu)$ en lugar del valor clásico $\mathcal{E} = kT$, es:

$$\rho_T(\nu) d\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1} d\nu \quad (1-27)$$

Esto es, el *espectro del cuerpo negro de Planck*. En la figura 1-11, se comparan los resultados de la teoría de Planck (expresados en términos de longitudes de onda) con resultados experimentales

para una temperatura $T = 1595^\circ\text{K}$. Los resultados experimentales concuerdan con la fórmula de Planck, para toda temperatura.

Debe recordarse que Planck no alteró la distribución de Boltzmann, "todo" lo que hizo fue considerar la energía de las ondas electromagnéticas estacionarias, oscilando senoidalmente en el tiempo, como una cantidad discreta en lugar de una cantidad continua.

Ejemplo 1-4. Derivar la expresión de Planck para la energía promedio $\bar{\mathcal{E}}$ y su espectro del cuerpo negro.

La cantidad $\bar{\mathcal{E}}$ se calcula de la razón de las sumas

$$\bar{\mathcal{E}} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \mathcal{E} P(\mathcal{E})}{\sum_{n=0}^{\infty} P(\mathcal{E})}$$

análogas a la razón de integrales en (1-21). Debido al postulado de Planck, la energía \mathcal{E} se convierte en una variable discreta que toma sólo los valores $\mathcal{E} = 0, h\nu, 2h\nu, 3h\nu, \dots$ y por lo tanto, se deben utilizar sumas. Es decir, $\mathcal{E} = nh\nu$, donde $n = 0, 1, 2, 3, \dots$. Evaluando la distribución de Boltzmann $P(\mathcal{E}) = e^{-\mathcal{E}/kT}/kT$, se tiene

$$\bar{\mathcal{E}} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{nh\nu}{kT} e^{-nh\nu/kT}}{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{kT} e^{-nh\nu/kT}} = kT \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n\alpha e^{-n\alpha}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\alpha}} \quad \text{donde } \alpha = \frac{h\nu}{kT}$$

Lo anterior, a su vez, puede evaluarse más fácilmente si se observa que;

$$-\alpha \frac{d}{d\alpha} \ln \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\alpha} = \frac{-\alpha \frac{d}{d\alpha} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\alpha}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\alpha}} = \frac{-\sum_{n=0}^{\infty} \alpha \frac{d}{d\alpha} e^{-n\alpha}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\alpha}} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n\alpha e^{-n\alpha}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\alpha}}$$

de manera que,

$$\bar{\mathcal{E}} = kT \left(-\alpha \frac{d}{d\alpha} \ln \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\alpha} \right) = -h\nu \frac{d}{d\alpha} \ln \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\alpha}$$

Ahora bien,

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\alpha} &= 1 + e^{-\alpha} + e^{-2\alpha} + e^{-3\alpha} + \dots \\ &= 1 + X + X^2 + X^3 + \dots \end{aligned}$$

pero

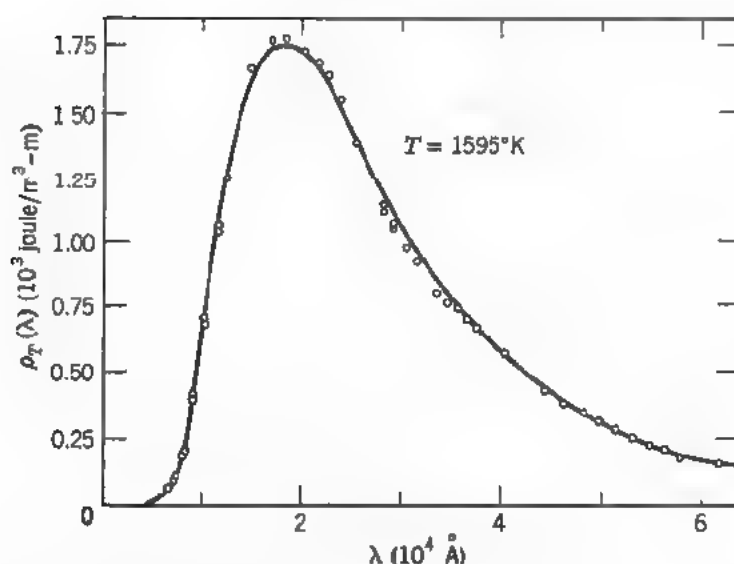
$$(1 - X)^{-1} = 1 + X + X^2 + X^3 + \dots$$

de modo que;

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{E}} &= -h\nu \frac{d}{d\alpha} \ln (1 - e^{-\alpha})^{-1} \\ &= \frac{-h\nu}{(1 - e^{-\alpha})^{-1}} (-1)(1 - e^{-\alpha})^{-2} e^{-\alpha} \\ &= \frac{h\nu e^{-\alpha}}{1 - e^{-\alpha}} = \frac{h\nu}{e^{\alpha} - 1} = \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1} \end{aligned}$$

Se ha derivado (1-26) para la energía promedio de una onda electromagnética estacionaria de frecuencia ν . Multiplicando lo anterior por (1-12), a saber, el número $N(\nu) d\nu$ de ondas que tienen frecuencia ν , que se derivó en el ejemplo 1-3, inmediatamente se obtiene el espectro de Planck del cuerpo negro, (1-27).

Ejemplo 1-5. Al analizar resultados experimentales, como en la figura 1-11, resulta conveniente expresar el espectro de Planck del cuerpo negro, en función de la longitud de onda λ , en lugar de la

**FIGURA 1-11**

Predicción de Planck de la densidad de energía (línea continua) comparada con los resultados experimentales (círculos) para la densidad de energía de un cuerpo negro. Los datos fueron reportados por Coblenz en 1916, correspondientes a una temperatura de 1595°K. El autor señala en su artículo que después de dibujar las curvas de los espectros de energía que resultaron de sus experimentos, "debido a fatiga de los ojos, fue imposible durante los meses subsiguientes, dedicar atención a la reducción de los datos". Una vez que los datos fueron reducidos, se obtuvo un valor de la constante de Planck de 6.57×10^{-34} joule-seg.

frecuencia ν . Obtener $\rho_T(\lambda)$, el espectro de Planck en términos de la longitud de onda, a partir de $\rho_T(\nu)$, la forma del espectro en términos de ν . La cantidad $\rho_T(\lambda)$ se define por la igualdad $\rho_T(\lambda) d\lambda = -\rho_T(\nu) d\nu$. El signo menos indica que aunque $\rho_T(\lambda)$ y $\rho_T(\nu)$ son positivas ambas $d\lambda$ y $d\nu$ tienen signos opuestos (Un aumento en la frecuencia corresponde a una disminución en la longitud de onda).

De la relación $\nu = c/\lambda$ se tiene que $d\nu = -(c/\lambda^2) d\lambda$, o bien, $d\nu/d\lambda = -(c/\lambda^2)$, de manera que

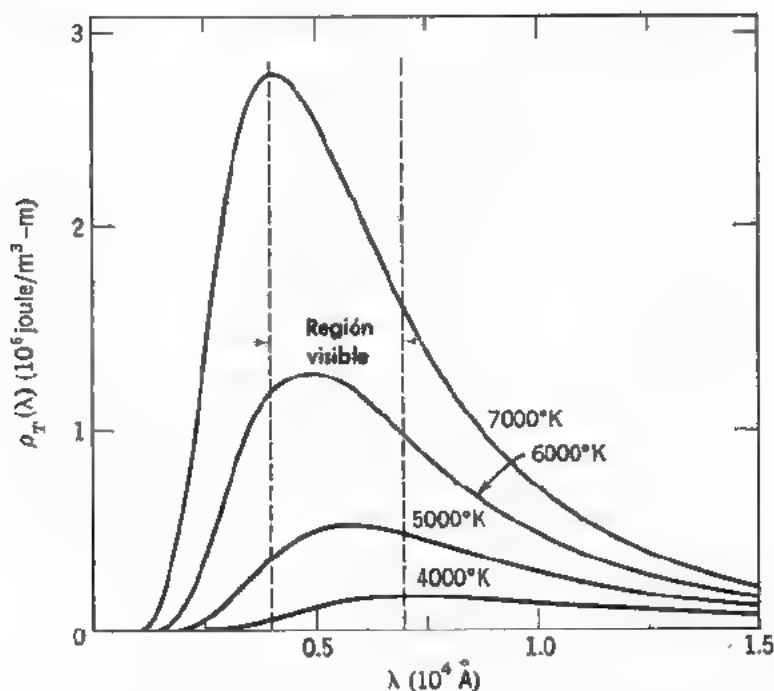
$$\rho_T(\lambda) = -\rho_T(\nu) \frac{d\nu}{d\lambda} = \rho_T(\nu) \frac{c}{\lambda^2}$$

Si ahora se sustituye $\nu = c/\lambda$ en la expresión para $\rho_T(\nu)$ (1-27), se obtiene

$$\rho_T(\lambda) d\lambda = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{d\lambda}{e^{hc/\lambda kT} - 1} \quad (1-28)$$

En la figura 1-12 se muestra $\rho_T(\lambda)$ contra λ para diferentes temperaturas. Al estudiar la distribución de energía radiante como función de la longitud de onda, a medida que aumenta la temperatura, se puede observar, claramente, una tendencia en la radiación del rojo al blanco y al azul. ◀

A partir de la fórmula de Planck, se pueden derivar la ley de Stefan y la ley del desplazamiento de Wien; si se las ajusta a los resultados experimentales, se pueden determinar valores para las constantes h y k . La ley de Stefan se obtiene integrando la ley de Planck en todo el espectro de longitudes de onda. Se encuentra que la radiancia es proporcional a la cuarta potencia de la temperatura, identificando la constante de proporcionalidad $2\pi^5 k^4 / 15c^2 h^3$ con la constante de Stefan, σ , cuyo valor, determinado experimentalmente, es $5.67 \times 10^{-8} \text{ W/m}^2 \cdot \text{K}^4$. La ley del desplazamiento de Wien, se obtiene haciendo $d\rho(\lambda)/d\lambda = 0$, y se encuentra que $\lambda_{\text{máx}} T =$

**FIGURA 1-12**

Densidad de energía de Planck de la radiación de un cuerpo negro, a varias temperaturas, como función de la longitud de onda. Obsérvese que la longitud de onda para la cual la curva tiene un máximo, decrece a medida que la temperatura aumenta.

$0.2014hc/k$; identificándose al miembro a la derecha de la ecuación con la constante, $2.898 \times 10^{-13} \text{ m}^\circ\text{K}$, determinada experimentalmente por Wien. Utilizando estos valores medidos y suponiendo un valor para la velocidad de la luz c , se pueden calcular los valores de h y k . De hecho, esto lo realizó Planck y sus valores concuerdan muy bien con los obtenidos posteriormente por otros métodos.

1.5 Aplicación de la ley de radiación de Planck en termometría

La radiación emitida por un cuerpo caliente puede utilizarse para medir su temperatura. Si lo que se utiliza es la radiación total, entonces, de la ley de Stefan-Boltzmann, se sabe que las energías emitidas por dos fuentes están en razón de la cuarta potencia de la temperatura. Sin embargo, es difícil medir la radiación total de la mayoría de las fuentes y realmente, lo que se mide es la radiancia en una banda finita de longitudes de onda. En este caso se utiliza la ley de radiación de Planck que proporciona la radiancia como función de la temperatura y longitud de onda. Para radiación monocromática de longitud de onda λ la razón de intensidades espectrales emitidas por fuentes a $T_2^\circ\text{K}$ y $T_1^\circ\text{K}$, está dada por la ley de Planck como:

$$\frac{e^{hc/\lambda k T_1} - 1}{e^{hc/\lambda k T_2} - 1}$$

En esta expresión, si se toma T_1 , como temperatura de referencia estándar, se puede determinar T_2 relativa a la estándar, midiendo esa razón en forma experimental. Este es el procedimiento empleado en la Escala Internacional de Temperaturas Prácticas, donde se utiliza el punto de fusión del oro, 1068°C , como punto fijo de referencia. Es decir, el *pirómetro óptico* estándar primario, está diseñado de modo tal, que compara la radiación de un cuerpo negro, a

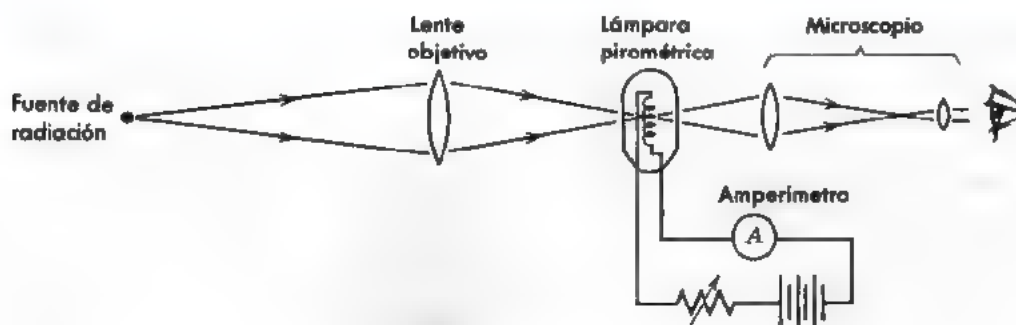
**FIGURA 1-13**

Diagrama esquemático de un pirómetro óptico.

temperatura desconocida $T > 1068^{\circ}\text{C}$ con un cuerpo negro a la temperatura de fusión del oro. Dadas las circunstancias prácticas, la mayoría de las fuentes no son cuerpos negros y en lugar de la radiación monocromática se utiliza una banda finita de longitudes de onda, de modo que los procedimientos de medida deben ser adecuados y la teoría desarrollada, para tomar en consideración las circunstancias anteriores.

La mayoría de los pirómetros ópticos, utilizan el ojo humano como detector y requieren de un ancho de banda espectral suficientemente amplio, de modo que se tenga la energía que el ojo puede ver. El tipo de instrumento más simple y más preciso utilizado por encima del punto de fusión del oro, es el pirómetro óptico con filamento desvanescente, (ver figura 1-13). La fuente a medirse se enfoca en el filamento de la lámpara del pirómetro, ajustándose la corriente de la lámpara hasta que el filamento tienda a desaparecer en el fondo de la imagen de la fuente. Calibrando cuidadosamente mediante potenciómetros de precisión, se garantizan medidas precisas de la temperatura.

En la década 1950, Dicke, Penzias y Wilson descubrieron un interesante caso particular del campo general de la termometría por medio de radiación de cuerpo negro. Utilizando un radio telescopio que operaba en el intervalo de longitudes de onda entre varios milímetros y varios centímetros, encontraron que un espectro de cuerpo negro, con temperatura característica de 3°K , incide sobre la tierra en todas direcciones con igual intensidad. La uniformidad en dirección indica que la radiación llena uniformemente el universo. Los astrofísicos consideraron estas medidas como evidencia fuerte en favor de la llamada *teoría de la gran explosión*, en la cual, el universo consistía de una bola de fuego muy densa y muy caliente de radiación y partículas, aproximadamente hace 10^{10} años. Debido a una expansión posterior y el consecuente corrimiento Doppler, es de esperarse que la temperatura de la radiación disminuyera a un valor muy cercano del observado de 3°K .

1.6 El postulado de Planck y sus implicaciones

La contribución de Planck se puede enunciar en forma de postulado, como sigue:

Cualquier ente físico con un grado de libertad, cuya "coordenada" es una función senoidal del tiempo (es decir realiza oscilaciones armónico-simples) sólo puede poseer energías totales \mathcal{E} , que satisfacen la relación

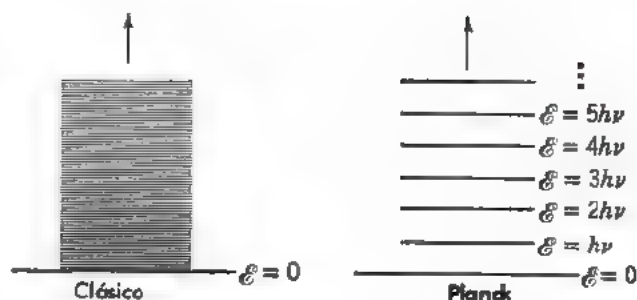
$$\mathcal{E} = nh\nu \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

donde ν es la frecuencia de la oscilación y h es una constante universal

La palabra coordenada se utiliza en su sentido más general, para denotar cualquier cantidad que describa la condición instantánea del ente, por ejemplo, la longitud de un resorte, la

FIGURA 1-14

Izquierda: Energías permitidas en un sistema clásico, oscilando senoidalmente con frecuencia ν , distribuidas en forma continua. *Derecha:* Energías permitidas distribuidas en forma discreta de acuerdo con el postulado de Planck, ya que sólo pueden tener los valores $n h \nu$. Se dice que la energía está cuantizada, siendo n el número cuántico del estado de energía permitido.



posición angular de la masa de un péndulo y la amplitud de una onda. Todos estos ejemplos también son funciones senoidales del tiempo.

Un modo conveniente de ilustrar el comportamiento de un ente gobernado por este postulado, es mediante un diagrama de niveles de energía, como se muestra en la figura 1-14, que también puede utilizarse para contrastar este comportamiento con el que se esperaría en base a la física clásica. En ese diagrama se indican cada uno de los estados de energía posibles del ente, por una línea horizontal. La distancia de una línea determinada, a la línea de energía cero, es proporcional a la energía total que le corresponde. Como de acuerdo con la física clásica, el ente puede tener cualquier energía entre cero e infinito, el diagrama clásico de niveles de energías consiste de un continuo de líneas que empiezan en cero y se extiende a valores mayores. Sin embargo, el ente que realiza oscilaciones del tipo oscilador armónico simple, sólo puede tener energías totales discretas, $E = 0, h\nu, 2h\nu, 3h\nu, \dots$, si obedece el postulado de Planck. En su diagrama de niveles de energía, esto se indica con un conjunto discreto de líneas. Si la energía del ente obedece el postulado de Planck, se dice que está *cuantizada*, los niveles de energía permitidos se llaman *estados cuánticos* y el número entero n se llama el *número cuántico*.

El estudiante podría pensar que existen sistemas físicos cuyo comportamiento esté en obvio desacuerdo con el postulado de Planck. Por ejemplo, un péndulo ordinario realiza oscilaciones de tipo oscilador armónico simple y sin embargo, aparentemente es capaz de poseer valores continuos de la energía. Pero antes de aceptar este argumento, se harán algunos cálculos numéricos en relación con dicho sistema.

Ejemplo 1-6. Un péndulo que consiste de una masa de 0.01 Kg. suspendida de una cuerda de 0.1 m. de longitud. Sea la amplitud de su oscilación tal, que la cuerda en sus posiciones extremas forma un ángulo de 0.1 rad. con la vertical. La energía del péndulo decrece, por ejemplo, por efectos de fricción. ¿Se observará que este decrecimiento de la energía es continuo o discontinuo?

La frecuencia de oscilación del péndulo es:

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{g}{l}} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{9.8 \text{ m/seg}^2}{0.1 \text{ m}}} = 1.6/\text{seg}$$

La energía del péndulo es su energía potencial máxima

$$\begin{aligned} mgh &= mgl(1 - \cos \theta) = 0.01 \text{ kg} \times 9.8 \text{ m/seg}^2 \times 0.1 \text{ m} \times (1 - \cos 0.1) \\ &= 5 \times 10^{-5} \text{ joule} \end{aligned}$$

La energía del péndulo está cuantizada, de modo que los cambios en energía ocurren en pasos de magnitud discontinuos $\Delta E = h\nu$, pero

$$\Delta E = h\nu = 6.63 \times 10^{-34} \text{ joule-seg} \times 1.6/\text{seg} = 10^{-33} \text{ joule}$$

mientras que $E = 5 \times 10^{-5} \text{ joule}$. Por lo tanto, $\Delta E/E = 2 \times 10^{-29}$. Así pues, para poder medir que el decrecimiento de la energía es discreto, se necesita poder medir la energía con una precisión de 2 en 10^{29} .

Evidentemente aún el equipo experimental más sensible, resulta totalmente incapaz para obtener dicha resolución en la energía.

En conclusión, aquellos experimentos que involucren péndulos ordinarios, no podrán determinar si el postulado de Planck es válido o no. La pequeñez de h , hace que la granularidad de la energía sea tan fina que no pueda distinguirse de un continuo de energías. Más aún, para sistemas clásicos, la h podría considerarse igual a cero y, de hecho, un modo de reducir las fórmulas cuánticas a sus límites clásicos, es dejando $h \rightarrow 0$ en estas fórmulas. Solamente cuando se consideren sistemas en los cuales ν sea tan grande y/o \mathcal{E} tan pequeña que $\Delta\mathcal{E} = h\nu$ sea del orden de \mathcal{E} , se estará en condiciones de probar el postulado de Planck. Un ejemplo es, desde luego, la radiación de ondas estacionarias de alta frecuencia del cuerpo negro. En los siguientes capítulos se considerarán muchos otros ejemplos.

1.7 Un poco de la historia del quantum

El postulado de Planck, en su forma original, no tenía el alcance que tiene en la forma como aquí se ha presentado. En su trabajo original, Planck trató en detalle, el comportamiento de los electrones en las paredes de un cuerpo negro y su acoplamiento a la radiación electromagnética dentro de la cavidad. Este acoplamiento conduce al mismo factor ν^2 que se obtuvo en (1.12) de argumentos más generales debidos a Rayleigh y Jeans. A través de este acoplamiento, Planck relacionaba la energía en una componente particular de las frecuencias de radiación del cuerpo negro, con la energía de un electrón en la pared, oscilando senoidalmente a la misma frecuencia y postuló que únicamente la energía de la partícula oscilante está cuantizada. No fue sino hasta un tiempo después, que, Planck aceptó la idea de que las ondas electromagnéticas oscilantes estuvieran así mismo cuantizadas y el postulado se amplió para incluir cualquier ente cuya única coordenada oscile senoidalmente.

En un principio, Planck no estaba seguro si su introducción de la constante h no era más que un recurso matemático o un asunto con significado físico muy profundo. En una carta dirigida a R. W. Wood, Planck llamó a su postulado limitado, "un acto de desesperación". "Sabía", escribió, "que el problema (del equilibrio de la materia con la radiación) tiene una importancia fundamental para la física; conocía la fórmula que reproduce la distribución de energías en el espectro normal; una interpretación teórica tenía que encontrarse a cualquier precio, sin importar qué tan alto". Por más de una década, Planck trató de ajustar las ideas cuánticas a la teoría clásica. Con cada intento aparentaba retroceder de su osadía original, pero siempre generaba nuevas ideas y técnicas que posteriormente adoptó la teoría cuántica. Lo que parece ser que finalmente lo convenció de que su hipótesis cuántica era correcta y de significado profundo, fue su apoyo a la definitividad del concepto estadístico de la entropía y a la tercera ley de la termodinámica.

Fue durante este período de dudas, que Planck era editor de la revista de investigación alemana *Annalen der Physik*. En 1905 recibió el primer artículo de Einstein sobre relatividad, y valientemente defendió el trabajo de Einstein. A partir de entonces se convirtió en uno de los defensores del joven Einstein en los círculos científicos, pero resistió durante algún tiempo, precisamente aquellas ideas de Einstein, sobre la teoría cuántica de la radiación, que contribuyeron a confirmar y extender el propio trabajo de Planck. La profunda visión que Einstein tenía del electromagnetismo y la mecánica estadística, que posiblemente no fue igualada por sus contemporáneos, le permitió predecir, como resultado del trabajo de Planck, la necesidad de un cambio general en la mecánica estadística y el electromagnetismo. Muchos fenómenos físicos fueron predichos e interpretados anticipadamente los cuales posteriormente fueron dramáticamente confirmados experimentalmente. En el siguiente capítulo se tratará uno de estos fenómenos y se seguirá otro camino rumbo a la mecánica cuántica.

PREGUNTAS

1. ¿Un cuerpo negro siempre se ve negro? Explique el término cuerpo negro.
2. En un fuego hecho con carbón, los huecos que quedan entre carbones se ven más brillantes que los

carbones mismos. ¿Será la temperatura de dichos huecos, apreciablemente mayor que la correspondiente a la superficie exterior de un carbón incandescente?

3. Si se observa dentro de una cavidad cuyas paredes se mantienen a una temperatura constante, ¿es visible algún detalle del interior? Explíquese.
4. La relación $R_T = \sigma T^4$ es exacta para cuerpos negros y se mantiene a toda temperatura. ¿Por qué no se utiliza esta relación como base para una definición de temperatura, por ejemplo, 100°C?
5. Un pedazo de metal se pone incandescente con un color rojo brillante a 1100°K. Sin embargo, a esta misma temperatura, un pedazo de cuarzo simplemente no brilla. Explique. (Sugerencia: el cuarzo es transparente a la luz visible).
6. Haga una lista de las funciones de distribución que más comúnmente se usan en las ciencias sociales (es decir, distribución de familias respecto de sus ingresos). En cada caso, especifique si la variable de la distribución descrita es discreta o continua.
7. En (1-4) se relacionan radiancia espectral y densidad de energía, ¿qué unidades deberá tener la constante de proporcionalidad?
8. ¿Cuál es el origen de la catástrofe ultravioleta?
9. La ley de equipartición de la energía requiere que el calor específico de los gases sea independiente de la temperatura, en desacuerdo con la experimentación. Aquí se ha visto que conduce a la ley de radiación de Rayleigh-Jeans, que también está en desacuerdo con la experimentación, ¿se pueden relacionar estas dos fallas de la ley de equipartición?
10. Comparar las definiciones y dimensiones de radiancia espectral, $R_T(\nu)$, radiancia, R_T , y densidad de energía $\rho_T(\nu)$.
11. ¿Por qué se utiliza la pirometría óptica por arriba del punto de fusión del oro y no por abajo de él? ¿En qué objetos se mide típicamente la temperatura de este modo?
12. ¿Existen cantidades cuantizadas en física clásica? ¿Está cuantizada la energía en física clásica?
13. ¿Tiene sentido hablar en física de cuantización de carga? ¿En qué sentido difiere de la cuantización de la energía?
14. Las partículas elementales parecen tener un conjunto discreto de masas en reposo. ¿Se puede esto considerar como cuantización de masa?
15. En muchos sistemas clásicos las frecuencias permitidas están cuantizadas. Mencione algunos de dichos sistemas. ¿También se cuantiza la energía?
16. Demuestre que la constante de Planck tiene dimensiones de impulso angular. ¿Sugiere esto, necesariamente, que el impulso angular es una cantidad cuantizada?
17. ¿Cuál deberá ser el orden de magnitud mínimo de h , para que los efectos cuánticos sean efectos cotidianos?
18. La radiación universal de cuerpo negro a 3°K, ¿qué puede decir, si acaso, de la temperatura del espacio exterior?
19. La teoría de Planck ¿sugiere estados de energía atómicos cuantizados?
20. Discutir el hecho sorprendente de que la discreción de la energía se descubrió, por primera vez, al analizar el espectro continuo emitido por átomos interactuantes en un sólido, en lugar de encontrarlo en el análisis de un espectro discreto tal como el emitido por un átomo aislado en un gas.

PROBLEMAS

1. ¿A qué longitud de onda, una cavidad a 6000°K radiará más por unidad de longitud de onda?
2. Demuestre que la constante de proporcionalidad en (1-4) es $4/C$. Es decir, demuestre que la relación entre la radiancia espectral $R_T(\nu)$ y la densidad de energía $\rho_T(\nu)$ es $R_T(\nu) d\nu = (c/4)\rho_T(\nu) d\nu$.
3. Considere dos cavidades de forma y material arbitrarios, cada una a la misma temperatura T , conectadas por un tubo angosto en el que se pueden colocar filtros de colores (supuestamente ideales) que permitirán el paso de radiación de una sola frecuencia ν . (a) Suponga que para cierta frecuencia ν' , $\rho_T(\nu')$ para la cavidad 1, resulta mayor que $\rho_T(\nu')$ para la cavidad 2. Se coloca un filtro en el tubo interconector, que sólo deja pasar la frecuencia ν . Analice qué sucederá en términos de flujo de energía. (b) Qué pasará con sus temperaturas respectivas. (c) Demuestre que esto violaría la segunda ley de la termodinámica; por lo tanto, pruebe que todos los cuerpos negros a la misma temperatura emitirán radiación térmica con el mismo espectro, independientemente de su composición.
4. Un radiador de cavidad, tiene un agujero de 10.0 mm. de diámetro que se perforó en una pared. Encuentre la potencia radiada a través del agujero, en el intervalo entre 5500 - 5510 Å. (Sugerencia: ver el problema 2).
5. (a) Suponiendo que la temperatura en la superficie del sol es 5700°K , utilice la ley de Stefan, (1-2), para determinar la masa en reposo que se pierde por segundo en la radiación del sol. Tome el diámetro del sol como 1.4×10^9 m. (b) ¿Qué fracción de la masa en reposo del sol, se pierde cada año en radiación electromagnética? Suponga que la masa en reposo del sol es $2.0 \times 10^{30}\text{kg}$.
6. En una explosión termonuclear, la temperatura en la bola de fuego es, momentáneamente, 10^7 °K. Encuentre la longitud de onda para la cual la radiación emitida es máxima.
7. A una temperatura dada. $\lambda_{\text{máx}} = 6500$ Å para una cavidad de cuerpo negro. ¿Cuál será $\lambda_{\text{máx}}$ si la temperatura de las paredes de la cavidad aumenta de modo que la razón de emisión de radiación espectral se duplica?
8. ¿A qué longitud de onda emite el cuerpo humano su radiación térmica máxima? Haga una lista de las hipótesis que se hagan para llegar a una respuesta.
9. Suponiendo que $\lambda_{\text{máx}}$ está en el infrarrojo cercano para calor rojo, y en el ultravioleta cercano para calor azul. En la ley del desplazamiento de Wien aproximadamente, ¿qué temperatura corresponderá al calor rojo? ¿Al calor azul?
10. La razón promedio de radiación solar que incide sobre la tierra, por unidad de área es $0.485 \text{ cal/cm}^2\text{-min}$ (o 355 W/m^2). (a) Explique la consistencia de este número con la constante solar (energía solar que llega a la tierra por unidad de tiempo incidiendo normal a una unidad de área de la superficie terrestre) cuyo valor es $1.94 \text{ cal/cm}^2\text{-min}$ (o 1340 W/m^2). (b) Considere la tierra como un cuerpo negro que radia energía al espacio en esta misma razón. ¿Cuál sería la temperatura de la superficie de la tierra bajo estas circunstancias?
11. Demuestre que la ley de radiación de Rayleigh-Jeans, (1-17), no es consistente con la ley del desplazamiento de Wien $\nu_{\text{máx}} \propto T$, (1-3a), o $\lambda_{\text{máx}} T = \text{const}$, (1-3b).
12. A partir del espectro del cuerpo negro, $\nu_{\text{máx}}$ se puede obtener de $d\rho_T(\nu)/d\nu = 0$ y $\lambda_{\text{máx}}$ de $d\rho_T(\lambda)/d\lambda = 0$. ¿Por qué a partir de $\lambda_{\text{máx}} T = \text{const}$ o $\nu_{\text{máx}} = \text{const} \times T$ no es posible obtenerlas si se utiliza simplemente $\lambda_{\text{máx}} = c/\nu_{\text{máx}}$? Es decir, ¿por qué es erróneo suponer que $\nu_{\text{máx}}\lambda_{\text{máx}} = c$, donde c es la velocidad de la luz?
13. Considere los números siguientes: 2, 3, 3, 4, 1, 2, 2, 1, 0, como representando el número de cuadrangulares, logrado por cada miembro de los Orioles de Baltimore en un juego reciente. (a) Calcular directamente el número promedio de cuadrangulares por hombre. (b) Sea x una variable que

especifica el número de cuadrangulares obtenidos por un hombre, y sea $f(x)$ el número de veces que el número x aparece. Demuestre que el número promedio de cuadrangulares por hombre se puede escribir como

$$\bar{x} = \frac{\sum_0^4 xf(x)}{\sum_0^4 f(x)}$$

(c) Sea $p(x)$ la probabilidad de obtener el número x . Demuestre que \bar{x} está dado por

$$\bar{x} = \sum_0^4 xp(x)$$

14. Considere la función

$$f(x) = \frac{1}{10} (10 - x)^2 \quad 0 \leq x \leq 10$$

$$f(x) = 0 \quad \text{para cualquier otra } x$$

(a) A partir de

$$\bar{x} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} xf(x) dx}{\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx}$$

encuentre el valor promedio de x . (b) Suponga que la variable x es discreta en lugar de continua. Además, $\Delta x = 1$, de modo que x sólo toma valores enteros 0, 1, 2, ..., 10. Calcule \bar{x} y compárelo con el resultado de la parte (a). (Sugerencia: puede ser más fácil calcular la suma apropiada directamente, en lugar de trabajar con fórmulas generales de sumas). (c) Calcule \bar{x} para $\Delta x = 5$, es decir $x = 0, 5, 10$. Compárelo con el resultado de la parte (a). (b) Obtenga analogías entre los resultados obtenidos en este problema y el análisis de la sección 1-4. Asegúrese de entender los papeles que juegan $\bar{\mathcal{E}}$, $\Delta \mathcal{E}$, y $P(\mathcal{E})$.

15. Usando la relación $P(\mathcal{E}) = e^{-\mathcal{E}/kT}/kT$ y $\int_0^{\infty} P(\mathcal{E}) d\mathcal{E} = 1$, evaluar la integral de (1-21), para deducir (1-22). $\bar{\mathcal{E}} = kT$

16. Utilizando la relación $R_T(\nu) d\nu = (c/4) \rho_T(\nu) d\nu$ entre la radiancia espectral y la densidad de energía junto con la ley de radiación de Planck, derivar la ley de Stefan. Es decir, demuestre que:

$$R_T = \int_0^{\infty} \frac{2\pi h}{c^2} \frac{\nu^3 d\nu}{e^{h\nu/kT} - 1} = \sigma T^4$$

donde $\sigma = 2\pi^5 k^4 / 15c^2 h^3$

$$\left(\text{Sugerencia: } \int_0^{\infty} \frac{q^3 dq}{e^q - 1} = \frac{\pi^4}{15} \right)$$

17. Derive la ley del desplazamiento de Wien, $\lambda_{\text{máx}} T = 0.2014 hc/k$, resolviendo la ecuación $d\rho(\lambda)/d\lambda = 0$. (Sugerencia: haga $hc/\lambda kT = x$ y demuestre que la ecuación citada conduce a $e^{-x} + x/5 = 1$. Después, demuestre que $x = 4.965$ es la solución).

18. Para verificar exprese mentalmente que la recientemente descubierta radiación universal de 3°K, se ajusta precisamente a un espectro de cuerpo negro, se decide medir $R_T(\lambda)$ desde una λ debajo de $\lambda_{\text{máx}}$, donde su valor es $0.2R_T(\lambda_{\text{máx}})$ hasta una λ por encima de $\lambda_{\text{máx}}$ donde su valor es otra vez $0.2R_T(\lambda_{\text{máx}})$. ¿En qué intervalo de λ deberán hacerse las medidas?

Fotones-Propiedades corpusculares de la radiación

2.1	Introducción	47
	Interacción de radiación con materia.	
2.2	El efecto fotoeléctrico	47
	Potencial de frenamiento; frecuencia de corte; ausencia de tiempo de retraso.	
2.3	Teoría cuántica de Einstein del efecto fotoeléctrico	50
	Fotones; cuantización de la energía del fotón, función de trabajo; reevaluación de la constante de Planck; espectro electromagnético; conservación del impulso.	
2.4	El efecto Compton	55
	Corrimiento Compton; derivación de las ecuaciones de Compton; longitud de onda de Compton; dispersión de Thomson; competencia entre las dispersiones Thomson y Compton.	
2.5	Naturaleza dual de la radiación electromagnética	61
	Difracción; desdoblamiento de personalidad de la radiación electromagnética; actitud contemporánea de los Físicos.	
2.6	Fotones y emisión de rayos X	62
	Emisión de rayos X; bremsstrahlung; relación de bremsstrahlung a efecto fotoeléctrico.	
2.7	Producción y aniquilación de pares	65
	Positrones; producción de pares electrón-positrón; aniquilación de pares; positronio; teoría de Dirac de los positrones.	

Fotones-Propiedades corpusculares de la radiación

2.1 Introducción

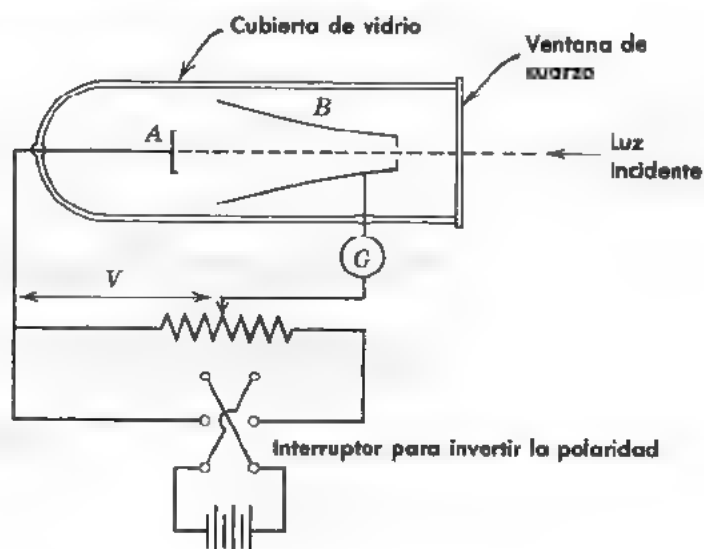
En este capítulo se examinarán los procesos en los cuales la radiación interacciona con la materia. Los procesos que implican la dispersión o absorción de radiación por materia son tres, a saber: el efecto fotoeléctrico, el efecto Compton y la producción de pares. Mientras que la producción de radiación se debe al bremsstrahlung o a la aniquilación de pares. En cada caso se obtendrá evidencia experimental de que la radiación es de carácter corpuscular en su interacción con la materia a diferencia de su naturaleza ondulatoria cuando se propaga. En el capítulo siguiente se estudiará una generalización de este resultado debida a de Broglie, y que conduce directamente a la mecánica cuántica. Parte del material de estos dos capítulos será una revisión de tópicos que el estudiante conoce de sus cursos de física elemental.

2.2 El efecto fotoeléctrico

Los experimentos que confirmaron por vez primera la existencia de las ondas electromagnéticas y la teoría electromagnética de Maxwell acerca de la propagación de la luz fueron realizados por Heinrich Hertz en 1886 y 1887. Es uno de aquellos hechos fascinantes y paradójicos en la historia de la ciencia es el que Hertz observó en el curso de sus experimentos, este efecto lo usaría Einstein después para contradecir otros aspectos de la teoría electromagnética clásica. Hertz descubrió que una descarga eléctrica entre dos electrodos ocurre más fácilmente cuando sobre uno de ellos incide luz ultravioleta. Lenard, continuando algunos experimentos de Hallwachs demostró en seguida que la luz ultravioleta facilita la descarga debido a que ocasiona la emisión de electrones desde la superficie del cátodo, a esta emisión de electrones desde una superficie por la acción de la luz se le denomina *efecto fotoeléctrico*.

En la figura 2-1 se muestra un aparato utilizado para estudiar el efecto fotoeléctrico. Una envoltura de vidrio encierra al aparato en un espacio al vacío, la luz incidente que es monocromática penetra a través de una ventana de cuarzo, incide sobre la placa de metal *A* y libera electrones, (llamados *fotoelectrones*). Los cuales si es que son atraídos a la copa de metal *B* mediante una diferencia de potencial V aplicada entre *A* y *B* se podrán detectar como una corriente. El amperímetro *G* sirve para medir esta corriente fotoeléctrica.

La curva *a* de la figura 2-2 es una gráfica de la corriente fotoeléctrica como función de la diferencia de potencial V para un aparato como el de la figura 2 1. Si V se hace lo suficientemente grande, la corriente fotoeléctrica alcanza cierto valor límite (valor de saturación), para el cual todos los fotoelectrones emitidos desde *A* son colectados por la copa *B*.

**FIGURA 2-1**

Aparato utilizado para estudiar el efecto fotoeléctrico. El voltaje V se puede variar en magnitud de manera continua y también es posible, mediante el interruptor, invertir el signo.

Si se invierte el signo de V , la corriente fotoeléctrica no cae inmediatamente a cero, lo cual sugiere que los electrones son emitidos desde A con energía cinética; algunos alcanzarán el punto B sin importar que el campo eléctrico se oponga a su movimiento. Sin embargo, si esta diferencia de potencial se hace lo suficientemente grande se alcanzará un valor V_0 para el cual la corriente fotoeléctrica se hace igual a cero, a este valor se le llama *potencial de frenamiento*. Esta diferencia de potencial V_0 multiplicada por la carga del electrón es una medida de la energía cinética $K_{\text{máx}}$ de los fotoelectrones *más rápidos*. Es decir

$$K_{\text{máx}} = eV_0 \quad (2-1)$$

Experimentalmente resulta que la cantidad $K_{\text{máx}}$ es independiente de la intensidad de la luz tal como la muestra la curva b de la figura 2-2 en la cual la intensidad de la luz se ha reducido a la mitad del valor utilizado para obtener la curva a .

La figura 2-3 muestra el potencial de frenamiento V_0 como función de la frecuencia de la luz que incide sobre el sodio. Obsérvese que existe una frecuencia de *corte* (ν_0) bien definida, por

FIGURA 2-2

Gráficas de la corriente I como función del voltaje V según los datos tomados con el aparato de la figura 2-1. La diferencia de potencial V se considera positiva cuando la copa B de la figura 2-1 es positiva con respecto a la superficie fotoeléctrica. En la curva b la intensidad de la luz incidente se ha reducido a la mitad de la de la curva a . El potencial de frenamiento V_0 es independiente de la intensidad de la luz pero las corrientes de saturación I_a e I_b son directamente proporcionales a él.

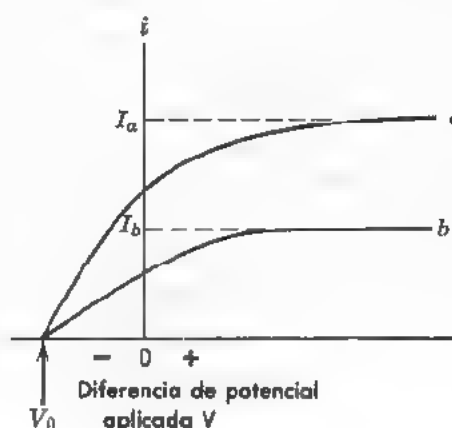
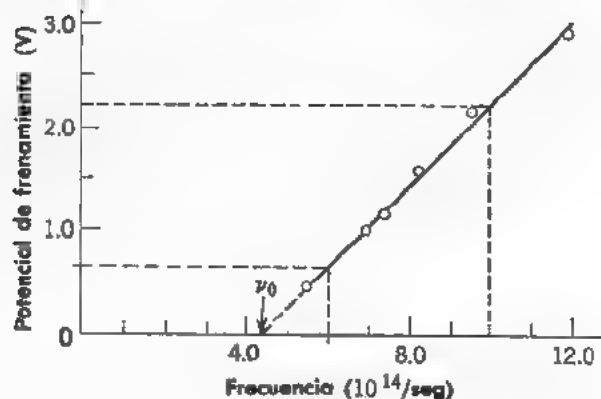


FIGURA 2-3

Gráfica de las medidas realizadas por Millikan para el potencial de frenamiento en función de la frecuencia para el caso del sodio. La frecuencia de corte ν_0 es 4.39×10^{14} Hz.



debajo de la cual no ocurre el efecto fotoeléctrico. Estos datos fueron tomados en 1914 por Millikan, quien por su esmerado trabajo sobre el efecto fotoeléctrico se hizo acreedor al premio Nobel de 1923. Debido a que el efecto fotoeléctrico para luz en el visible, o en el visible cercano es un fenómeno fundamentalmente de superficie, es necesario evitar en los experimentos capas de óxido, grasa o cualquier otro contaminante de la superficie.

Existen tres hechos fundamentales del efecto fotoeléctrico que no pueden explicarse en términos de la teoría clásica ondulatoria de la luz:

1. La teoría ondulatoria exige que el vector eléctrico oscilante E de la onda luminosa aumente en amplitud conforme aumenta la intensidad del haz luminoso. Puesto que la fuerza aplicada al electrón es eE , se sugiere que la energía cinética de los fotoelectrones también debería aumentar de acuerdo con el aumento en intensidad del haz luminoso. Sin embargo, la figura 2-2 muestra que K_{\max} , que es igual a eV_0 , es independiente de la intensidad de la luz. Esto ha sido probado sobre un intervalo de intensidades de 10^7 .

2. Según la teoría ondulatoria, el efecto fotoeléctrico debería ocurrir para cualquier frecuencia de la luz tomando en cuenta solamente que la intensidad de la luz sea lo suficientemente intensa como para dar la energía necesaria para emitir los fotoelectrones. Sin embargo, la figura 2-3 muestra que para cada superficie existe una frecuencia de corte característica ν_0 . Para frecuencias menores de ν_0 , el efecto fotoeléctrico no ocurre, sin importar qué tan intensa sea la iluminación.

3. Si la energía adquirida por un fotoelectrón es absorbida de la onda que incide sobre la placa de metal, el "área efectiva del blanco" para un electrón en un metal está limitada y probablemente no sea mucho mayor que un círculo de un diámetro atómico. En la teoría clásica la energía luminosa se encuentra uniformemente distribuida sobre el frente de onda. Entonces, si la luz es suficientemente débil existirá un tiempo de retraso mensurable entre el instante en que la luz empieza a incidir sobre la superficie y la expulsión del fotoelectrón, que se estimará en el ejemplo 2-1. Durante este intervalo el electrón deberá absorber energía del haz hasta acumular la suficiente para escapar. Sin embargo, nunca se ha medido un tiempo de retraso mensurable. Este desacuerdo es particularmente interesante cuando la substancia fotoeléctrica es un gas, bajo estas circunstancias pueden aparecer mecanismos de absorción colectiva y la energía del fotoelectrón emitido deberá ser extraída del haz luminoso por un solo átomo o molécula.

Ejemplo 2-1. A una distancia de un metro de una fuente luminosa cuya potencia es $1 \text{ W} = 1 \text{ joule seg}^{-1}$ se coloca una placa de potasio. Supóngase que un fotoelectrón emitido puede recibir su energía en un área circular de la placa cuyo radio r es, por ejemplo, un radio atómico: $r \approx 1 \times 10^{-10} \text{ m}$. La energía necesaria para extraer un electrón de la superficie del potasio es aproximadamente $2.1 \text{ eV} = 3.4 \times 10^{-19} \text{ joules}$ (un electronvolt $= 1 \text{ eV} = 1.60 \times 10^{-19} \text{ joules}$ es la energía ganada por un electrón de carga $1.6 \times$

10^{-19} coulombs, que cae a través de una diferencia de potencial de 1 V). ¿Cuánto tiempo le tomaría a este blanco absorber esta cantidad de energía de la fuente luminosa? Supóngase que la energía luminosa está esparcida uniformemente sobre el frente de onda.

El área del blanco es $\pi r^2 = \pi \times 10^{-20} \text{ m}^2$. El área de una esfera de un metro con centro en la fuente es $4\pi(1 \text{ m})^2 = 4\pi \text{ m}^2$. Entonces, si la fuente radia uniformemente en todas direcciones (es decir, si la energía está uniformemente distribuida sobre frentes de onda esféricos que emergen desde la fuente, según la teoría clásica) la razón R a la cual la energía cae sobre el blanco está dada por

$$R = 1 \text{ joule/seg} \times \frac{\pi \times 10^{-20} \text{ m}^2}{4\pi \text{ m}^2} = 2.5 \times 10^{-21} \text{ joule/seg}$$

Suponiendo que toda esta potencia se absorbe, se puede calcular el tiempo necesario para que los electrones adquieran energía suficiente para escapar; por lo tanto

$$t = \frac{3.4 \times 10^{-19} \text{ joule}}{2.5 \times 10^{-21} \text{ joule/seg}} = 1.4 \times 10^2 \text{ seg} \simeq 2 \text{ min}$$

Por supuesto, se podría modificar la descripción anterior con objeto de reducir el tiempo calculado suponiendo una mayor área efectiva del blanco. La suposición más favorable, que la energía se transfiere de la onda luminosa al electrón mediante un proceso resonante, conduce a una área del blanco de λ^2 , donde λ es la longitud de onda de la luz, pero se podría obtener un tiempo de retraso finito que estaría dentro de nuestra habilidad experimental para medir, por ejemplo $\lambda = 100 \text{ Å}$, segundos. (Para luz ultravioleta de $t \simeq 10^{-2} \text{ seg}$. Sin embargo, no se ha detectado ningún tiempo de retraso bajo ninguna circunstancia y los primeros experimentos fijaron un límite superior de 10^{-9} segundos sobre cualquier retraso posible.

2.3 Teoría cuántica de Einstein del efecto fotoeléctrico

En 1905 Einstein puso en duda la teoría clásica de la luz, propuso una nueva teoría y citó el efecto fotoeléctrico como una de las aplicaciones que podría probar cuál teoría era la correcta. Esto fue enunciado muchos años antes al trabajo de Millikan, pero Einstein estaba influenciado por el experimento de Lenard. Como ya se ha mencionado, originalmente Planck restringió su concepto de cuantización de la energía al electrón radiante en las paredes de una cavidad de cuerpo negro; Planck pensaba que la energía electromagnética una vez radiada se esparcía en el espacio de la misma manera que las ondas de agua se esparcen en ella. En vez de esto, Einstein propuso que la energía radiante estaba cuantizada en paquetes concentrados a los cuales posteriormente se les llamó *fotones*.

Einstein argumentaba que los experimentos ópticos tan bien conocidos sobre interferencia y difracción de radiación electromagnética solamente se habían efectuado en situaciones en las cuales el número de fotones era muy grande. Estos experimentos dan resultados que son promedios de los comportamientos de los fotones individuales. En estos experimentos la presencia de los fotones no se manifiesta, como tampoco lo hacen las gotas de agua individuales en un rocío fino proveniente de una manguera de jardín si el número de gotas es muy grande. Por supuesto que los experimentos sobre interferencia y difracción muestran de manera definitiva que los fotones no viajan desde donde son emitidos hasta donde son absorbidos en la forma simple en que lo hacen las partículas clásicas tales como las gotas de agua. Viajan como ondas clásicas en el sentido de que los cálculos que se basan en la forma en la que se propagan las ondas (y en particular la forma en que dos ondas se refuerzan o nulifican entre sí dependiendo de sus fases relativas) explican correctamente las medidas del modo en el que viajan los fotones promedio.

Einstein no enfocó su atención en la forma ondulatoria de propagación de la radiación, sino que primero pensó en la forma en la cual se emiten y absorben los corpúsculos. Pensó que el requisito de Planck acerca de que la energía contenida en las ondas electromagnéticas de

frecuencia ν es una fuente radiante (por ejemplo una fuente de luz ultravioleta en un experimento fotoeléctrico) sólo podía ser cero, $0 h\nu, 0 2h\nu, \dots 0 nh\nu, \dots$ implicaba que en el proceso de ir de un estado de energía $nh\nu$ a un estado de energía $(n - 1) h\nu$ la fuente debería emitir pulsos de energía electromagnética discretos con contenido energético $h\nu$

Einstein supuso que dicho paquete de energía está localizado inicialmente en un volumen de espacio pequeño y que se mantiene localizado mientras se mueve apartándose de la fuente con velocidad c . Supuso que la cantidad de energía E del paquete o fotón está relacionada con su frecuencia ν mediante la ecuación

$$E = h\nu \quad (2-2)$$

También supuso que en el proceso fotoeléctrico un fotón es completamente absorbido por un electrón del fotocátodo.

Cuando se emite un electrón desde la superficie del metal, su energía cinética es

$$K = h\nu - w \quad (2-3)$$

donde $h\nu$ es la energía del fotón incidente absorbido y w es el trabajo necesario para sacar al electrón del metal. Este trabajo es el necesario para superar tanto los campos atractivos de los átomos en la superficie, como las pérdidas de energía cinéticas debidas a las colisiones internas del electrón. Algunos de los electrones están ligados más fuertemente que otros y algunos pierden energía en colisiones durante el trayecto; en el caso en el que el enlace sea el más débil y no existan pérdidas internas, el fotoelectrón emergerá con la energía cinética máxima K_{\max} . Por lo tanto,

$$K_{\max} = h\nu - w_0 \quad (2-4)$$

donde w_0 que es una energía característica del metal denominada la *función trabajo* es la energía mínima necesaria para que el electrón pase a través de la superficie del metal y escape a las fuerzas atractivas que normalmente fijan el electrón al metal.

Ahora se contemplará la manera en la que la hipótesis de Einstein acerca del fotón encara las tres objeciones manifestadas en contra de la interpretación que la teoría ondulatoria hace del efecto fotoeléctrico. Respecto a la primera objeción (la falta de dependencia de K_{\max} con la intensidad de iluminación), existe completa concordancia entre la teoría del fotón y el experimento, puesto que duplicando la intensidad de la luz simplemente se duplica el número de fotones y por ende la corriente fotoeléctrica; esto no cambia la energía $h\nu$ de los fotones individuales o la naturaleza del proceso fotoeléctrico individual descrito por (2-3).

Según la ecuación (2-4) la objeción 2 (la existencia de una frecuencia de corte) desaparece. Si K_{\max} es igual a cero se tiene

$$h\nu_0 = w_0 \quad (2-5)$$

lo cual asevera que un fotón de frecuencia ν_0 tiene justamente la energía suficiente para extraer los fotoelectrones y nada extra que aparezca como energía cinética. Si la frecuencia se reduce por debajo de ν_0 , los fotoelectrones individuales, sin importar cuántos haya, (esto es, sin importar la intensidad de la iluminación) no tendrán individualmente energía suficiente para extraer fotoelectrones.

En la teoría del fotón se hace a un lado la objeción 3 (la ausencia de un tiempo de retraso), debido a que la energía necesaria se suministra en paquetes concentrados y no se esparce uniformemente sobre un área grande como se supuso en el ejemplo 2-1, el cual está basado en la suposición de que la teoría ondulatoria clásica es cierta. Si existe cualquier iluminación incidiendo sobre el cátodo, entonces existirá cuando menos un fotón que colinda con él y este fotón será absorbido inmediatamente por *algún* átomo resultando de inmediato en la emisión de un fotoelectrón.

Se volverá a escribir la ecuación de Einstein para el efecto fotoeléctrico, (2-4), substituyendo eV_0 por K_{max} de la ecuación (2-1). Se tiene

$$V_0 = \frac{h\nu}{e} - \frac{w_0}{e}$$

Por lo tanto la teoría de Einstein predice una relación lineal entre el potencial de frenamiento V_0 y la frecuencia ν en completa concordancia con los resultados experimentales que se muestran en la figura 2-3. La pendiente de la curva experimental en la figura debe ser h/e , o

$$\frac{h}{e} = \frac{2.20 \text{ V} - 0.65 \text{ V}}{10.0 \times 10^{14}/\text{seg} - 6.0 \times 10^{14}/\text{seg}} = 3.9 \times 10^{-15} \text{ V-seg}$$

Multiplicando esta relación por la carga electrónica e es posible determinar h , resultando $h = 3.9 \times 10^{-15} \text{ V-seg} \times 1.6 \times 10^{-19} \text{ coul} = 6.2 \times 10^{-34} \text{ joule seg}$. De un análisis más cuidadoso y de estos y otros datos incluyendo algunos tomados con superficies de litio, Millikan encontró el valor $h = 6.57 \times 10^{-34} \text{ joules-seg}$ con una precisión de aproximadamente 0.5%. Este resultado se ajusta con el valor de h derivado a partir de la fórmula de la radiación de Planck. El acuerdo numérico en dos determinaciones de h usando fenómenos y teorías completamente diferentes es sorprendente. Un valor de h obtenido recientemente partiendo de diversos experimentos es

$$h = 6.6262 \times 10^{-34} \text{ joule-seg}$$

Citando a Millikan: "El efecto fotoeléctrico... constituye una prueba que es totalmente independiente de los hechos de la radiación del cuerpo negro, de la validez de la suposición fundamental de la teoría cuántica, a saber la suposición de una emisión discontinua o explosiva de la energía absorbida por los constituyentes electrónicos de los átomos de las... ondas. Materializa, por así decirlo, la cantidad h descubierta por Planck mediante el estudio de la radiación del cuerpo negro y nos proporciona una confianza de que la concepción física fundamental que sustenta el trabajo de Planck corresponde a la realidad, confianza que no nos inspira ningún otro tipo de fenómeno".

Ejemplo 2-2. A partir de la figura 2-3 deducir la función trabajo del sodio.

La intersección de la recta con el eje horizontal es la frecuencia de corte $\nu_0 = 4.39 \times 10^{14}/\text{seg}$ que substituido en (2-5) resulta en

$$\begin{aligned} w_0 &= h\nu_0 = 6.63 \times 10^{-34} \text{ joule-seg} \times 4.39 \times 10^{14}/\text{seg} \\ &= 2.92 \times 10^{-19} \text{ joule} \times \frac{1 \text{ eV}}{1.60 \times 10^{-19} \text{ joule}} \\ &= 1.82 \text{ eV} \end{aligned}$$

De la figura 2-3 se obtiene este mismo valor si se observa la intersección de la prolongación de la recta con el eje vertical. Sin embargo, los experimentos modernos dan un valor ligeramente mayor, 2.27 eV.

Para la mayoría de los metales conductores el valor de la función trabajo es del orden de unos cuantos electrónvolts; valor que es el mismo que el de la función trabajo para emisión termiónica de estos metales. ◀

Ejemplo 2-3. ¿Cuál es la razón por unidad de área con la cual los electrones inciden sobre la placa de metal del ejemplo 2-1? Suponga que la luz es monocromática de longitud de onda 5890 Å (luz amarilla).

La razón por unidad de área con la cual caen los electrones sobre una placa de metal que dista 1 m de una fuente luminosa de un 1-W, es (ver ejemplo 2-1)

$$\begin{aligned} R &= \frac{1 \text{ joule/seg}}{4\pi(1 \text{ m})^2} = 8.0 \times 10^{-2} \text{ joule/m}^2\text{-seg} \\ &= 5.0 \times 10^{17} \text{ eV/m}^2\text{-seg} \end{aligned}$$

Cada fotón tiene una energía

$$\begin{aligned} E = h\nu &= \frac{hc}{\lambda} = \frac{6.63 \times 10^{-34} \text{ joule-seg} \times 3.00 \times 10^8 \text{ m/seg}}{5.89 \times 10^{-7} \text{ m}} \\ &= 3.4 \times 10^{-19} \text{ joule} \\ &= 2.1 \text{ eV} \end{aligned}$$

Por lo tanto, la razón R con la cual los fotones inciden sobre un área unitaria de la placa es

$$R = 5.0 \times 10^{17} \text{ eV/m}^2\text{-seg} \times \frac{1 \text{ fotones}}{2.1 \text{ eV}} = 2.4 \times 10^{17} \frac{\text{fotones}}{\text{m}^2\text{-seg}}$$

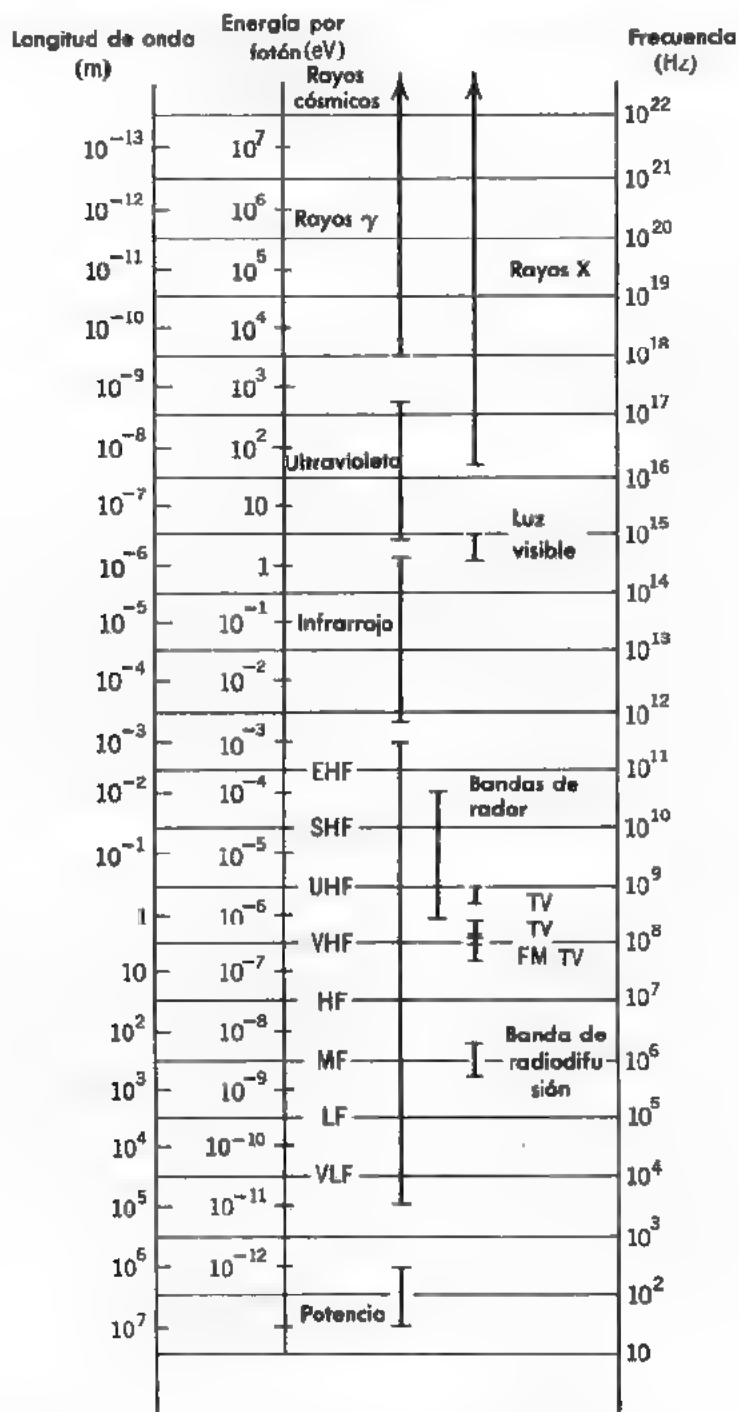
La razón por la cual se presenta la posibilidad de que ocurra el efecto fotoeléctrico es que la energía del fotón es justamente 2.1 eV, que coincide con la función de trabajo para la superficie del potasio (ver ejemplo 2-1). Obsérvese, que si se incrementa ligeramente la longitud de onda (es decir si ν se disminuye ligeramente) no se presentará efecto fotoeléctrico, sin importar cuán grande sea la razón R .

Este ejemplo sugiere que la intensidad de la luz I se puede considerar como el producto de N , el número de fotones por unidad de área por unidad de tiempo, y $h\nu$, la energía de un solo fotón. Se ve que aún a intensidades relativamente bajas ($\approx 10^{-1} \text{ W/m}^2$) el número N es extremadamente grande ($\approx 10^{17}$ fotones/ $\text{m}^2\text{-seg}$) de manera que la energía para uno cualquiera de los fotones es muy pequeña. Esto da cuenta de la fineza extremada de la granularidad de la radiación y sugiere el por qué ordinariamente es tan difícil el detectarla. Esto es análogo a detectar la estructura atómica de la materia, la cual para la mayoría de los propósitos se puede considerar como continua; su carácter discreto se pone de manifiesto solamente bajo circunstancias especiales.

En 1921 Einstein recibió el premio Nobel por la predicción teórica que hizo de la ley del efecto fotoeléctrico. Antes de que Millikan completara la confirmación experimental de esta ley (1914), Einstein fue recomendado por Planck y otros para ingresar como miembro en la Academia de Ciencias de Prusia. Su actitud negativa inicial acerca de la hipótesis del fotón se patentiza en su declaración firmada en elogio de Einstein, en la cual ellos escriben: "resumiendo, podemos decir que difícilmente existe entre los grandes problemas, en los que la física moderna es tan rica, uno al que Einstein no haya hecho una contribución importante. El que algunas veces haya perdido el objetivo en sus especulaciones, como por ejemplo en su hipótesis sobre los cuanta de luz (fotones), realmente no dice mucho en su contra porque no es posible introducir ideas fundamentalmente nuevas aun en la más exacta de las ciencias sin correr ocasionalmente un riesgo".

En la actualidad la hipótesis del fotón se usa en todo el espectro electromagnético y no sólo en la región luminosa (véase figura 2-4). Por ejemplo, se puede decir que una cavidad de microondas contiene fotones. Para $\lambda = 10 \text{ cm}$, una longitud de onda típica de microondas, se puede calcular que la energía del fotón es $1.20 \times 10^{-5} \text{ eV}$. Esta energía es demasiado pequeña para extraer fotoelectrones de superficies metálicas. Para rayos X o para rayos γ energéticos tales como los emitidos por núcleos radiactivos la energía del fotón puede ser de 10^6 eV o más. Esos fotones pueden extraer electrones internos ligados a átomos pesados con energías del orden de 10^5 eV . Los fotones en la región visible del espectro electromagnético no son lo suficientemente energéticos como para hacer esto, los fotoelectrones que ellos extraen provienen de los llamados electrones de *conducción* los cuales están ligados al metal con energías de unos cuantos electrónvolts.

Obsérvese que en el proceso fotoeléctrico los fotones son absorbidos, lo cual exige que los electrones estén ligados a los átomos o en sólidos, ya que un electrón realmente libre no puede absorber un fotón y conservar en el proceso, tanto su energía relativista total como su impulso. Por lo tanto, se deberá tener un electrón ligado de manera que las fuerzas de ligadura sirvan para transmitir el impulso al átomo o al sólido. Debido a la gran masa de un átomo o un sólido, comparada con la del electrón, el sistema puede absorber una gran cantidad de impulso sin adquirir una apreciable cantidad de energía. La ecuación de energía en el efecto fotoeléctrico

**FIGURA 2-4**

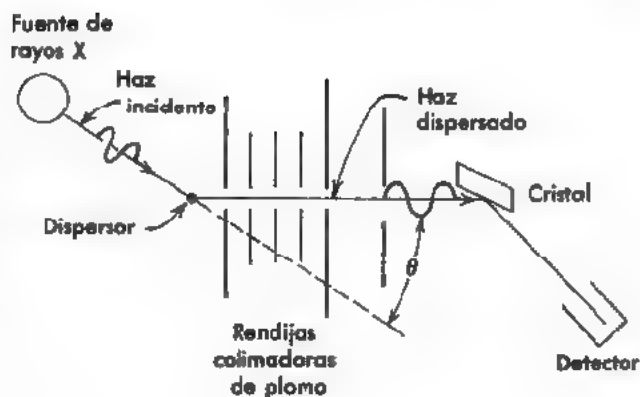
El espectro electromagnético mostrando la longitud de onda, la frecuencia y la energía por fotón sobre una escala logarítmica.

sigue siendo válida, el efecto sigue siendo posible sólo porque existe una partícula pesada que retrocede además de un electrón emitido. El efecto fotoeléctrico es una forma importante en la cual los fotones, de energías comparables con las de los rayos X o superiores, son absorbidas por la materia. A energías mayores resultan más importantes otros procesos de absorción de fotón tal como se verá posteriormente.

Por último, se debe hacer énfasis que en el modelo de Einstein un fotón de frecuencia ν tiene exactamente la energía $h\nu$ y no tiene energías que sean múltiplos enteros de $h\nu$. Por supuesto que puede haber n fotones de frecuencia ν de tal manera que la energía a tal frecuencia puede

FIGURA 2-5

Arreglo experimental utilizado por Compton. Los rayos X monocromáticos de longitud de onda λ inciden sobre un dispersor de grafito. La distribución de intensidades respecto a la longitud de onda se mide mediante los rayos X dispersados para cualquier ángulo de dispersión θ . Las longitudes de onda dispersadas se miden observando las reflexiones de Bragg del cristal (ver fig. 3-3). Sus intensidades se miden mediante un detector tal como una cámara de ionización.



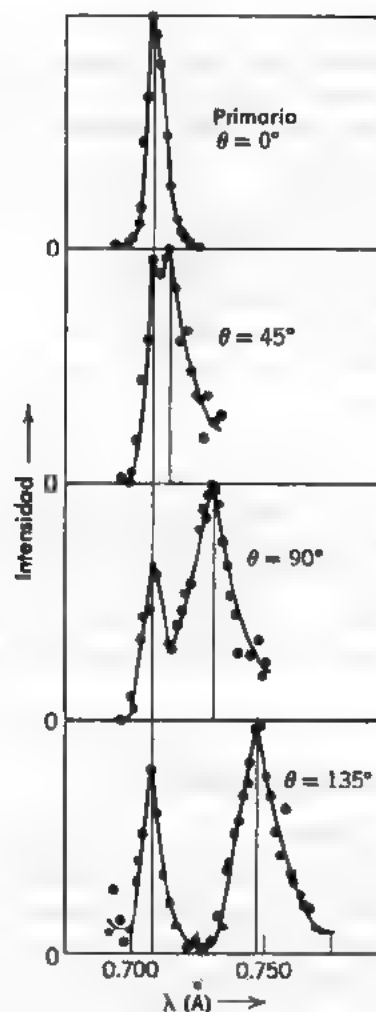
ser $nh\nu$. En el tratamiento de la radiación de la cavidad de cuerpo negro según el modelo de Einstein se trabaja con un "gas de fotones". Debido a que la energía radiante está localizada en el espacio en paquetes en vez de estar extendida a través del espacio en ondas estacionarias. Años después de la deducción de Planck de la fórmula para la radiación de la cavidad, Bose y Einstein derivaron la misma fórmula trabajando con un gas de fotones.

2.4 El efecto Compton

En el año de 1923 la naturaleza corpuscular de la radiación recibió una confirmación dramática proveniente de los experimentos de Compton. Como se muestra en la figura 2-5, Compton permitía que un haz de rayos X de longitud de onda λ perfectamente definida incidiera sobre un blanco de grafito. Para varios ángulos de dispersión, medía la intensidad de los rayos X dispersados como una función de su longitud de onda y sus resultados experimentales se muestran en la figura 2-6. Se observa que no obstante que el haz incidente consiste esencialmente de una sola longitud de onda λ , los rayos X dispersados tienen picos de intensidad para dos longitudes de onda; una de las cuales es la misma longitud de onda incidente y la otra, λ' , es mayor por una cantidad $\Delta\lambda$. Este corrimiento, llamado *corrimiento Compton*, $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda$ varía con el ángulo al que se observan los rayos X dispersados.

La presencia de una longitud de onda dispersada λ' no es posible entenderla si se considera a la radiación x incidente como una onda electromagnética clásica. En el modelo clásico, el vector oscilante de campo eléctrico en la onda incidente de frecuencia ν actúa sobre los electrones libres del blanco y los pone a oscilar a la misma frecuencia. Estos electrones oscilantes, como las cargas que van y vienen en una pequeña antena transmisora de radio, radían ondas electromagnéticas que tienen nuevamente esta misma frecuencia ν . Por lo tanto, en el modelo clásico la onda dispersada deberá tener la misma frecuencia ν y la misma longitud de onda λ que la onda incidente.

Compton (y Debye en forma independiente) interpretó su resultado experimental postulando que el haz de rayos X incidente no era una onda de frecuencia ν sino una colección de fotones cada uno de los cuales con energía $E = h\nu$ y que estos fotones chocaban con los electrones libres del blanco dispersor de manera similar a la colisión entre bolas de billar. Según este punto de vista, los fotones de "retroceso" que emergen del blanco constituyen la radiación dispersada. Puesto que el fotón incidente transfiere algo de su energía al electrón con el cual choca, el fotón dispersado deberá tener una energía menor E' ; y por lo tanto deberá tener una frecuencia menor $\nu' = E'/h$, lo cual implica una longitud de onda mayor $\lambda' = c/\nu'$. Esto viene a dar cuenta de manera cualitativa del corrimiento en longitud de onda $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda$. Obsérvese que en la interacción se considera a los rayos X como partículas y no como ondas y que a diferencia de su comportamiento en el proceso fotoeléctrico los fotones de rayos X son

**FIGURA 2-6**

Resultados experimentales de Compton. La línea continua vertical de la izquierda corresponde a la longitud de onda λ , y la de la derecha a λ' . Se muestran los resultados para cuatro distintos ángulos de dispersión (θ). Obsérvese que el corrimiento Compton $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda$, para $\theta = 90^\circ$, concuerda con la predicción teórica, 0.0243 Å.

dispersados en vez de ser absorbidos. Analicemos ahora cuantitativamente una sola colisión fotón-electrón.

Para una radiación x de frecuencia ν la energía de un fotón en el haz incidente es

$$E = h\nu$$

Tomando literalmente la idea de un fotón como un paquete de energía localizado, habrá que considerarlo como una partícula de energía E e impulso p ; sin embargo, tal partícula deberá tener propiedades muy especiales. Considérese la ecuación (ver apéndice A) que da la energía relativista total de una partícula en términos de su masa en reposo m_0 y su velocidad v .

$$E = m_0 c^2 / \sqrt{1 - v^2/c^2}$$

Puesto que la velocidad de un fotón es igual a c y puesto que su contenido energético $E = h\nu$ es finito, resulta evidente que la masa en reposo de un fotón deberá ser cero. Por lo tanto, se puede considerar al fotón como una partícula de masa en reposo cero y de energía total relativista E la cual es por completo energía cinética. El impulso de un fotón se puede evaluar de la relación general entre la energía relativista total E , el impulso p y la masa en reposo m_0 . Es decir,

$$E^2 = c^2 p^2 + (m_0 c^2)^2 \quad (2-6)$$

Para un fotón, el segundo término del segundo miembro es igual a cero y entonces se tiene

$$p = E/c = h\nu/c \quad (2-7)$$

o

$$p = h/\lambda \quad (2-8)$$

donde $\lambda = c/\nu$ es la longitud de onda de la radiación electromagnética que constituye al fotón. Resulta interesante observar que la teoría ondulatoria clásica de Maxwell para la radiación electromagnética conduce también a una ecuación $p = E/c$, en la que p representa el impulso de la radiación por unidad de volumen y E representa su energía por unidad de volumen.

Se observa que la frecuencia ν de la radiación dispersa es independiente del material blanco, lo cual implica que la dispersión no involucra átomos completos. Compton supuso que la dispersión era debida a las colisiones entre el fotón y un electrón individual en el blanco, también supuso que los electrones que participan en este proceso de dispersión son electrones libres e inicialmente estacionarios. Se pueden encontrar justificaciones *a priori* a estas suposiciones considerando el hecho de que la energía de un fotón de rayos X es mayor que la energía de un fotón ultravioleta en varios órdenes de magnitud y de la discusión del efecto fotoeléctrico resulta evidente que la energía de un fotón ultravioleta es comparable a la energía mínima con la cual un electrón está ligado en un metal.

Considérese, como en la figura 2-7, una colisión entre un fotón y un electrón libre estacionario. En el diagrama de la izquierda se muestra un fotón de energía relativista E_0 e impulso p_0 que incide sobre un electrón estacionario de energía en reposo m_0c^2 . En el diagrama de la derecha el fotón ha sido dispersado a un ángulo θ y se mueve con energía relativista total E_1 e impulso p_1 mientras que el electrón retrocede a un ángulo φ con energía cinética K e impulso p . Compton aplicó la conservación del impulso y de la energía relativista total a este problema de colisiones. Y utilizó ecuaciones relativistas ya que el fotón siempre se mueve con velocidades relativistas y el electrón que retrocede también se mueve, en la mayoría de los casos, bajo estas circunstancias.

La conservación del impulso exige

$$p_0 = p_1 \cos \theta + p \cos \varphi$$

y

$$p_1 \sin \theta = p \sin \varphi$$

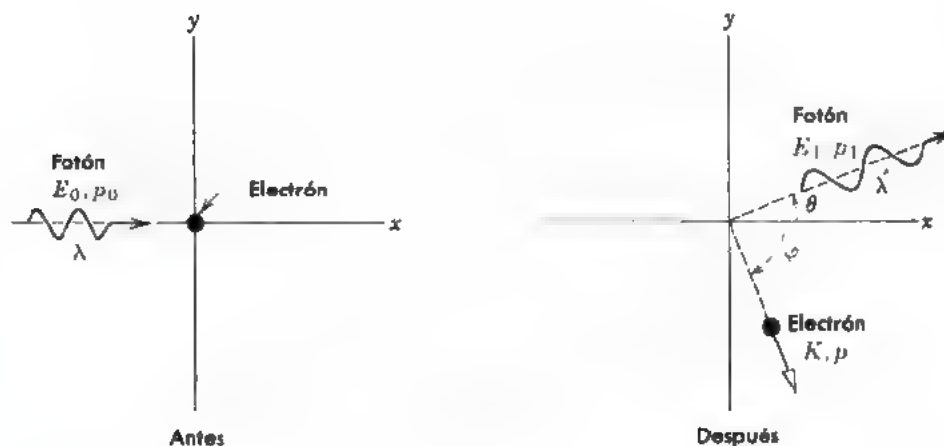


FIGURA 2-7

Interpretación de Compton. Un fotón de longitud de onda λ incide sobre un electrón libre en reposo. En la colisión el fotón es dispersado a un ángulo θ con una longitud de onda mayor λ' mientras que el electrón emerge a un ángulo φ .

Elevando al cuadrado estas dos ecuaciones se obtiene

$$(p_0 - p_1 \cos \theta)^2 = p^2 \cos^2 \varphi$$

y

$$p_1^2 \sin^2 \theta = p^2 \sin^2 \varphi$$

y sumando

$$p_0^2 + p_1^2 - 2p_0 p_1 \cos \theta = p^2 \quad (2-9)$$

La conservación de la energía relativista total requiere

$$E_0 + m_0 c^2 = E_1 + K + m_0 c^2$$

entonces

$$E_0 - E_1 = K$$

Y de acuerdo con (2-7), se tiene

$$c(p_0 - p_1) = K \quad (2-10)$$

Si en la ecuación (2-6) se escribe $K + m_0 c^2$ en vez de E se obtiene

$$(K + m_0 c^2)^2 = c^2 p^2 + (m_0 c^2)^2$$

Que se simplifica a

$$K^2 + 2K m_0 c^2 = c^2 p^2$$

o

$$K^2/c^2 + 2K m_0 = p^2$$

Evalutando p^2 de (2-9) y K de (2-10) se obtiene

$$(p_0 - p_1)^2 + 2m_0 c(p_0 - p_1) = p_0^2 + p_1^2 - 2p_0 p_1 \cos \theta$$

que se reduce a

$$m_0 c(p_0 - p_1) = p_0 p_1 (1 - \cos \theta)$$

o

$$\frac{1}{p_1} - \frac{1}{p_0} = \frac{1}{m_0 c} (1 - \cos \theta)$$

Multiplicando por h y utilizando (2-8), se obtiene la *ecuación de Compton*

$$\Delta\lambda = \lambda_1 - \lambda_0 = \lambda_C (1 - \cos \theta) \quad (2-11)$$

donde

$$\lambda_C \equiv h/m_0 c = 2.43 \times 10^{-12} \text{ m} = 0.0243 \text{ Å} \quad (2-12)$$

es la llamada *longitud de onda de Compton*.

Obsérvese que el *corrimiento Compton* $\Delta\lambda$, sólo depende del ángulo de dispersión θ y no de la longitud de onda inicial λ . La ecuación (2-11) predice los corrimientos Compton de la figura 2-6 observados experimentalmente dentro de los límites de la precisión experimental. Según (2-

11) $\Delta\lambda$ varía desde cero (para $\theta = 0$ que corresponde a una colisión "rasante" en la que el fotón incidente apenas si se defleca) hasta $2h/m_0c = 0.049 \text{ \AA}$ (para $\theta = 180^\circ$ que corresponde a una colisión de "frente" en la que el fotón incidente regresa por la misma dirección por donde vino). La figura 2-8 es una gráfica de $\Delta\lambda$ contra θ .

En experimentos subsiguientes (realizados por Compton, Simon, Wilson, Bothe, Geiger y Blass) se detectó el electrón de retroceso resultante, mostrando que éste aparece simultáneamente con los rayos X dispersados y confirmando cuantitativamente la predicción de la energía y dirección del electrón disperso.

Aún deberá explicarse la presencia de un pico en la figura 2-6 para el cual la longitud de onda del fotón no cambia en la dispersión. Hasta aquí se ha supuesto que el electrón con el cual el fotón choca es un electrón libre. Esta suposición es justificable aun cuando el electrón esté ligado inicialmente, si la energía cinética que adquiere éste durante la colisión es mucho mayor que su energía de enlace. Si el electrón está fuertemente ligado a un átomo del blanco o si la energía del fotón incidente es muy pequeña, existe alguna posibilidad de que el electrón no sea expulsado del átomo; en tal caso se puede considerar que la colisión tiene lugar entre el fotón y el átomo completo. La coraza iónica a la cual está ligado el electrón en el dispersor blanco retrocede como un todo durante la colisión, entonces la masa M del átomo es la masa característica del proceso y deberá substituirse por la masa del electrón m_0 en las ecuaciones de corrimiento de Compton. Puesto que $M \gg m_0$ ($M \simeq 22,000 m_0$ para el carbón, por ejemplo) el corrimiento Compton para colisiones con electrones fuertemente ligados es, como se puede ver de (2-11) y (2-12) inconmensurablemente pequeño (una millonésima de Angstrom para el carbón) de tal manera que el fotón dispersado no modifica su longitud de onda esencialmente. En resumen, algunos fotones son dispersados por electrones que a su vez son liberados por la colisión; estos fotones modifican su longitud de onda, por otra parte, hay otros fotones que son dispersados por electrones que permanecen ligados durante la colisión; en estos fotones no se modifica su longitud de onda.

Al proceso de fotones dispersados sin cambio en su longitud de onda se le llama *dispersión Thomson* en honor del físico que desarrolló la teoría clásica de la dispersión de rayos X por átomos, por el año 1900. Thomson consideró los rayos X como un haz de ondas electromagnéticas cuyo campo eléctrico oscilante interactuaba con las cargas de los electrones atómicos del blanco. Esta interacción produce fuerzas sobre los electrones que ocasionan aceleraciones

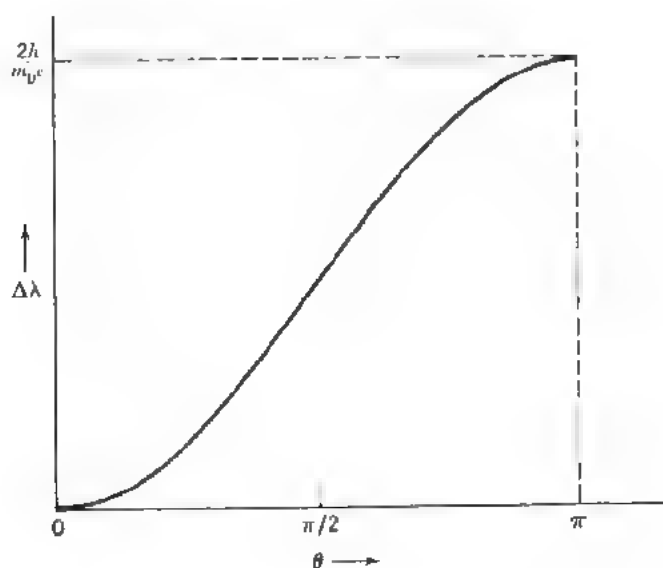


FIGURA 2-8

Resultado de Compton. $\Delta\lambda = (h/m_0c)(1 - \cos \theta)$.

oscilantes; como resultado de las aceleraciones, los electrones radiarán ondas electromagnéticas de la misma frecuencia y en fase con las ondas incidentes, por lo tanto los electrones atómicos absorben energía del haz incidente de rayos X y lo dispersan en todas direcciones sin modificar la longitud de onda. No obstante que esta explicación clásica de la dispersión es diferente a la explicación cuántica presentada en el párrafo anterior, ambas explican los mismos hechos observados en las mediciones. Por lo tanto, la dispersión de Thomson es un caso en el que concuerdan los resultados clásico y cuántico.

Es interesante el preguntar en qué región del espectro electromagnético será dominante el proceso de dispersión Thomson y en cuál el proceso Compton. Si la radiación incidente está en el espectro visible, microondas o radio, λ es extremadamente grande comparada con el corrimiento Compton $\Delta\lambda$, e independientemente, según la ecuación (2-12), de si se usa un electrón o una masa atómica para evaluar la longitud de onda Compton. Por consiguiente, la radiación dispersada en esta región del espectro tendrá en todas las circunstancias una longitud de onda que es la misma que la longitud de onda de la radiación incidente dentro de la precisión experimental. Así, cuando $\lambda \rightarrow \infty$ los resultados cuántico y clásico coinciden y la dispersión Thomson es la dominante. En la región del espectro que corresponde a los rayos X la dispersión Compton empieza a ser importante particularmente para blancos dispersores de número atómico bajo donde los electrones atómicos no están muy fuertemente ligados y el corrimiento de longitud de onda en la dispersión por un electrón que es liberado en el proceso empieza a ser fácilmente mensurable. En la región de rayos γ en la que $\lambda \rightarrow 0$, la energía del fotón se hace tan grande, que durante la colisión siempre hay un electrón liberado y domina la dispersión Compton.

Los resultados clásicos fallan al explicar la dispersión de radiación en la región de longitudes de onda cortas, como en la catástrofe ultravioleta de la física clásica donde las predicciones acerca de la radiación en una cavidad divergen radicalmente con los resultados experimentales para longitudes de onda cortas. Esto es debido al tamaño de la constante de Planck h . Para longitudes de onda largas la frecuencia ν es muy pequeña y como h también es pequeña la granularidad en la energía electromagnética, $h\nu$, es tan pequeña como para que sea virtualmente indistinguible del continuo de la física clásica. Pero a longitudes de onda suficientemente cortas donde ν es lo suficientemente grande, h ya no es tan pequeña como para ignorar los efectos cuánticos.

Ejemplo 2-4. Considérese un haz de rayos X con $\lambda = 1.000 \text{ \AA}$ y también un haz de rayos γ provenientes de una muestra Cs^{137} con $\lambda = 1.88 \times 10^{-12} \text{ \AA}$. Si la radiación dispersada por los electrones libres se observa a 90° del haz incidente: (a) ¿Cuál es el corrimiento en longitud de onda Compton en cada caso? (b) ¿Qué energía cinética se le comunica al electrón de retroceso en cada caso? (c) ¿Qué porcentaje de la energía del fotón incidente se pierde en la colisión en cada caso?

(a) El corrimiento Compton con $\theta = 90^\circ$, es

$$\begin{aligned}\Delta\lambda &= \frac{h}{m_0c} (1 - \cos \theta) = \frac{6.63 \times 10^{-34} \text{ joule-sec}}{9.11 \times 10^{-31} \text{ kg} \times 3.00 \times 10^8 \text{ m/sec}} \times (1 - \cos 90^\circ) \\ &= 2.43 \times 10^{-12} \text{ m} = 0.0243 \text{ \AA}\end{aligned}$$

Este resultado es independiente de la longitud de onda incidente y por lo tanto el mismo para rayos γ y para rayos X.

(b) La ecuación (2-10) se puede escribir como

$$hc/\lambda = hc/\lambda' + K$$

Entonces, puesto que $\lambda' = \lambda + \Delta\lambda$, se tiene

$$hc/\lambda = hc/(\lambda + \Delta\lambda) + K$$

de modo que $K = hc \Delta\lambda / \lambda(\lambda + \Delta\lambda)$.

Para el haz de rayos X con $\lambda = 1.00 \text{ \AA}$, se tiene

$$K = \frac{6.63 \times 10^{-34} \text{ joule-seg} \times 3.00 \times 10^8 \text{ m/seg} \times 2.43 \times 10^{-12} \text{ m}}{1.00 \times 10^{-10} \text{ m} \times (1.00 + 0.024) \times 10^{-10} \text{ m}} = 4.73 \times 10^{-17} \text{ joule} \\ = 295 \text{ eV} = 0.295 \text{ keV}$$

Para el haz de rayos γ con $\lambda = 1.88 \times 10^{-2} \text{ \AA}$, se tiene

$$K = \frac{6.63 \times 10^{-34} \text{ joule-seg} \times 3.00 \times 10^8 \text{ m/seg} \times 2.43 \times 10^{-12} \text{ m}}{1.88 \times 10^{-12} \text{ m} \times (0.0188 + 0.0243) \times 10^{-10} \text{ m}} = 5.98 \times 10^{-14} \text{ joule} \\ = 378 \text{ keV.}$$

(c) La energía del fotón de rayos X incidente es

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = \frac{6.63 \times 10^{-34} \text{ joule-seg} \times 3.00 \times 10^8 \text{ m/seg}}{1.00 \times 10^{-10} \text{ m}} = 1.99 \times 10^{-15} \text{ joule} \\ = 12.4 \text{ keV}$$

La energía perdida por el fotón es igual a la energía ganada por el electrón, 0.295 keV, de modo que la pérdida porcentual en energía es

$$\frac{0.295 \text{ keV}}{12.4 \text{ keV}} \times 100\% = 2.4\%$$

La energía del fotón del rayo γ incidente es

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = \frac{6.63 \times 10^{-34} \text{ joule-seg} \times 3.00 \times 10^8 \text{ m/seg}}{1.88 \times 10^{-12} \text{ m}} = 1.06 \times 10^{-13} \text{ joule} \\ = 660 \text{ keV}$$

La energía perdida por el fotón es igual a la ganada por el electrón, 378 keV, de modo que la pérdida porcentual en energía es

$$\frac{378 \text{ keV}}{660 \text{ keV}} \times 100\% = 57\%$$

En consecuencia, los fotones con más contenido energético (los cuales tienen longitudes de onda pequeñas) experimentan una mayor pérdida porcentual de energía en la dispersión Compton. Esto corresponde al hecho de que los fotones de longitud de onda menor experimentan un incremento porcentual mayor en su longitud de onda al ser dispersados. Esto resulta evidente de la expresión para la pérdida fraccional en energía, dada simplemente por

$$\frac{K}{E} = \frac{hc\Delta\lambda/\lambda(\lambda + \Delta\lambda)}{hc/\lambda} = \frac{\Delta\lambda}{\lambda + \Delta\lambda}$$

De esto se puede demostrar que para $\lambda = 5500 \text{ \AA}$, que corresponde a fotones visibles, la pérdida porcentual (para $\theta = 90^\circ$) es menor que un centésimo del 1% mientras que para $\lambda = 1.25 \times 10^{-2} \text{ \AA}$, que corresponde a fotones de rayos γ de 1 MeV la pérdida porcentual (para $\theta = 90^\circ$) es 67%. ◀

2.5 La naturaleza dual de la radiación electromagnética

En su artículo "teoría cuántica de la dispersión de rayos X por elementos ligeros" Compton escribió: "La presente teoría depende esencialmente de la suposición de que cada electrón que

es efectivo en la dispersión, dispersa un quantum completo (fotón). También involucra la hipótesis de que un quantum de radiación se recibe desde direcciones definidas y se dispersa en direcciones definidas. El soporte experimental de la teoría indica de manera muy convincente que un quantum de radiación lleva consigo su impulso y su energía”.

Es obvia la necesidad de interpretación en procesos que tratan de la interacción entre la radiación y la materia para un fotón o partícula localizada; pero al mismo tiempo es necesario una teoría ondulatoria de la radiación para entender los fenómenos de interferencia y difracción. Por consiguiente debe tomarse en serio la idea de que la radiación no es un fenómeno puramente ondulatorio ni es nada más un chorro de partículas. Sea lo que fuere la radiación, ésta se comporta como ondulatoria bajo algunas circunstancias y como corpuscular bajo otras. Efectivamente, esta situación se revela muy claramente en el trabajo experimental de Compton en el que; (a) se usa un espectrómetro de cristal para medir las longitudes de onda de los rayos X y las medidas se interpretan mediante una teoría ondulatoria de la difracción y (b) las dispersiones afectan la longitud de onda de una manera que sólo puede entenderse si se trata a los rayos X como partículas. Es en las expresiones $E=h\nu$ y $p = h/\lambda$ donde se combinan los atributos de las ondas (ν y λ) y los atributos de las partículas (E y p).

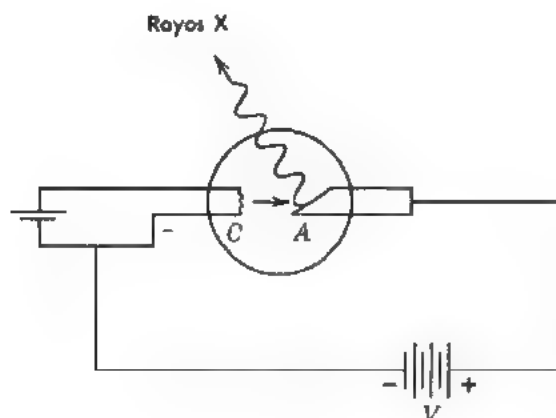
Sin embargo, muchos físicos se sintieron muy incómodos cuando contemplaron el “desdoblamiento de personalidad” de la radiación electromagnética, el punto de vista amplio que se ha proporcionado por el desarrollo de la mecánica cuántica ha ocasionado que la actitud contemporánea sea muy diferente. La evidente dualidad en la naturaleza onda-partícula de la radiación ya no se considera tan desusual debido a que ahora se conoce que es una característica general de todos los entes físicos. Se verá por ejemplo que los electrones y los protones tienen exactamente la misma naturaleza dual que los fotones. También se verá que es posible reconciliar la existencia de aspectos ondulatorios con la existencia de aspectos corpusculares para cualesquiera de estos entes con la ayuda de la mecánica cuántica.

2.6 Fotones y emisión de rayos X

Los rayos X, llamados así por su descubridor Roentgen debido a que entonces su naturaleza era desconocida, son radiaciones en el espectro electromagnético de longitudes de onda algo menores que 1.0 \AA . Muestran el comportamiento típico de una onda transversal, como polarización, interferencia y difracción que se encuentran en la luz y en todas las otras radiaciones electromagnéticas. Los rayos X se producen en el blanco de un tubo de rayos X como el mostrado en la figura 2-9, cuando un haz de electrones de alta energía, acelerados a través de una diferencia de potencial de miles de volts se frenan al chocar con el blanco. Según la física clásica (ver apéndice B) la desaceleración de los electrones hasta alcanzar el punto de

FIGURA 2-9

Tubo de rayos X. Los electrones son emitidos térmicamente desde el cátodo calentado C y se aceleran hacia el ánodo A mediante el potencial aplicado V . Los rayos X se emiten desde A cuando los electrones son detenidos por él.



reposo en el material blanco resulta en la emisión de un espectro continuo de radiación electromagnética.

La figura 2-10 muestra, para cuatro valores distintos de la energía del electrón incidente, como se distribuyen en longitud de onda los rayos X emitidos desde el blanco de tungsteno. (Además del espectro continuo de rayos X también son emitidas líneas de rayos X características del material blanco. Estas líneas serán analizadas en el capítulo 9). La característica más notable de estas curvas es que para una energía determinada del electrón existe una longitud de onda mínima bien definida λ_{\min} ; por ejemplo, para electrones de 40 keV, λ_{\min} es 0.311 Å. No obstante que la forma de la distribución del espectro continuo de rayos X depende ligeramente del material blanco escogido así como del potencial V que acelera los electrones, el valor de λ_{\min} depende sólo de V y es el mismo para todos los materiales blancos. La teoría electromagnética clásica no puede dar cuenta de este hecho ya que no existe razón por la cual ondas cuya longitud de onda es menor que cierto valor crítico no deban salir del blanco.

Sin embargo, existe una explicación si se considera a los rayos X como fotones. La figura 2-11 muestra el proceso elemental que desde el punto de vista del fotón, es responsable del espectro continuo de rayos X que muestra la figura 2-10. Un electrón de energía cinética inicial K es desacelerado durante una colisión con un núcleo pesado, la energía que éste pierde aparece en forma de radiación como un fotón de rayos X. El electrón interactúa con el núcleo cargado mediante el campo de Coulomb y transfiere impulso al núcleo. La desaceleración del electrón produce la emisión del fotón. El núcleo blanco es tan masivo, que la energía que adquiere durante la colisión se puede ignorar sin ningún problema. Si K' es la energía cinética del electrón después del choque, la energía del fotón es entonces

$$h\nu = K - K'$$

y la longitud de onda para el fotón se sigue de

$$hc/\lambda = K - K' \quad (2-13)$$

Los electrones del haz incidente pueden perder diferentes cantidades de energía en las colisiones y un determinado electrón podrá alcanzar el punto de reposo solamente después de muchas de ellas. Entonces los rayos X producidos por muchos electrones son los que constituyen el espectro continuo de la figura 2-10 y son muchos los fotones discretos cuyas

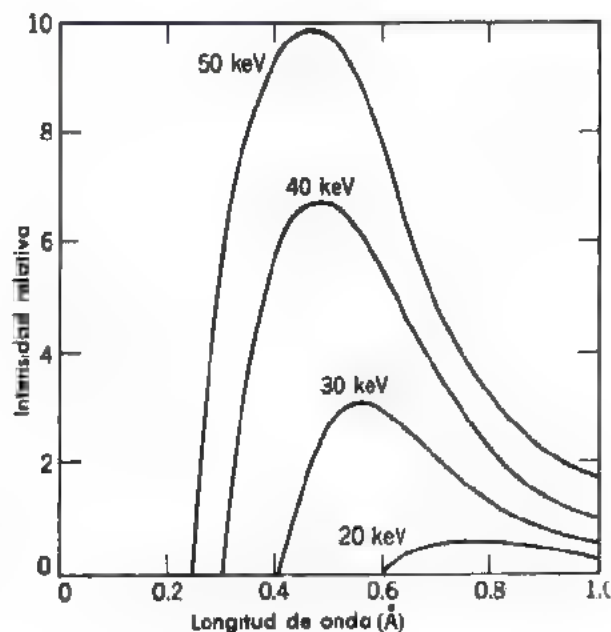


FIGURA 2-10

El espectro continuo de rayos X emitidos por un blanco de tungsteno para cuatro diferentes valores de la energía del electrón incidente (λ).

longitudes de onda varían desde λ_{\min} hasta $\lambda \rightarrow \infty$, correspondiendo a las diferentes pérdidas de energía en los choques individuales. El fotón de longitud de onda más corta debería emitirse cuando un electrón pierde toda su energía cinética en un proceso de desaceleración; entonces $K' = 0$ de modo que $K = hc/\lambda_{\min}$. Ya que K es igual a eV la energía adquirida por el electrón al acelerarse mediante la diferencia de potencial V aplicada al tubo de rayos X, se tiene

$$eV = hc/\lambda_{\min}$$

$$\lambda_{\min} = hc/eV \quad (2-14)$$

Entonces el mínimo de la longitud de onda de corte representa la conversión completa de la energía cinética del electrón en radiación X. La ecuación 2-14 muestra claramente que si $h \rightarrow 0$ entonces $\lambda_{\min} \rightarrow 0$, la cual es la predicción de la teoría clásica. Esto muestra que la existencia de una longitud de onda mínima es un fenómeno cuántico.

Al espectro continuo de radiación X de la figura 2-10 se le llama frecuentemente *bremsstrahlung*, del alemán *bremss* (igual a frenar, es decir, desacelerar) más *strahlung* (igual a radiación). El proceso de bremsstrahlung ocurre no solamente en tubos de rayos X sino en cualquier parte en que los electrones choquen con la materia, como en los rayos cósmicos, en los cinturones de radiación de van Allen que circundan la tierra y en el frenamiento de electrones que emergen de los aceleradores o núcleos radiactivos. El proceso de bremsstrahlung se puede considerar como un efecto fotoeléctrico inverso: en el efecto fotoeléctrico, se absorbe un fotón cuya energía e impulso van al electrón y al núcleo que retrocede; en el proceso de bremsstrahlung se crea un fotón cuya energía e impulso vienen de la colisión de un electrón y un núcleo. En el proceso bremsstrahlung se trata de la *creación* de fotones en vez de su absorción o dispersión por la materia.

Ejemplo 2-5. Determinar la constante de Planck h a partir del hecho de que la longitud de onda mínima de rayos X producida por electrones de 40 keV es 3.11×10^{-11} m.

De 2.14, se tiene

$$h = \frac{eV\lambda_{\min}}{c}$$

$$= \frac{1.60 \times 10^{-19} \text{ coul} \times 4.00 \times 10^4 \text{ V} \times 3.11 \times 10^{-11} \text{ m}}{3.00 \times 10^8 \text{ m/seg}}$$

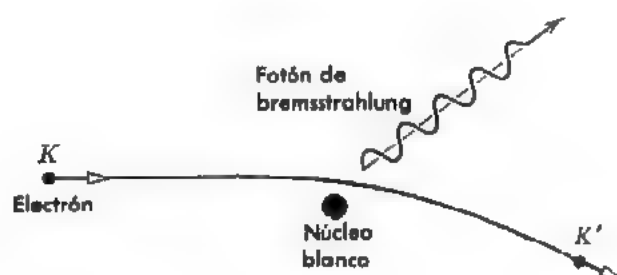
$$= 6.64 \times 10^{-34} \text{ joule-seg}$$

Esto está en concordancia con el valor de h deducido del efecto fotoeléctrico y del efecto Compton.

Mediciones de V , λ_{\min} , y c proporcionan uno de los métodos más precisos para evaluar la relación h/e . En 1951 Bearden, Johnson y Watts en la Universidad Johns Hopkins encontraron usando este procedimiento $h/e = 1.37028 \times 10^{-15}$ joule-seg/coul. Esta relación se combina con muchas otras medidas combinadas de constantes físicas, el conjunto de datos se analiza mediante métodos estadísticos elaborados para encontrar el "mejor" valor para las diferentes constantes físicas. Los mejores valores cambian (pero usualmente sólo dentro de una precisión estimada *a priori*) y se hacen más precisos conforme se tienen mejores datos experimentales.

FIGURA 2-11

El proceso de bremsstrahlung responsable de la emisión de rayos X en el espectro continuo.



2.7 Producción y aniquilación de pares

Además de los efectos fotoeléctrico y Compton existe otro proceso mediante el cual los fotones pierden su energía e interacción con la materia, este proceso es el llamado *producción de pares*. La producción de pares también es un ejemplo excelente de la conversión de energía radiante en energía de masa en reposo y energía cinética. En este proceso que se ilustra esquemáticamente en la figura 2-12 un fotón de alta energía pierde toda su energía $h\nu$ en una colisión con un núcleo creando un electrón y un positrón (*el par*) y proporcionándoles energía cinética. Un *positrón* es una partícula que es idéntica en todas sus propiedades a un electrón, excepto en el signo de su carga (y en su momento magnético) que es opuesta a la del electrón; un positrón es un electrón cargado positivamente. En la producción de pares la energía que toma el retroceso del núcleo es despreciable debido a que es muy masivo y por lo tanto el balance de la energía relativista total en el proceso es simplemente

$$h\nu = E_- + E_+ = (m_0c^2 + K_-) + (m_0c^2 + K_+) = K_- + K_+ + 2m_0c^2 \quad (2-15)$$

En esta expresión E_- y E_+ son las energías relativistas totales y K_- y K_+ son las energías cinéticas del electrón y positrón, respectivamente. Ambas partículas tienen la misma energía de masa en reposo m_0c^2 . El positrón se produce con una energía cinética ligeramente mayor a la del electrón debido a que la interacción de Coulomb del par con el núcleo cargado positivamente produce una aceleración en el positrón y una desaceleración en el electrón.

Al analizar este proceso se ignoran los detalles de la interacción misma, considerando solamente la situación antes y después de la interacción. Los principios que nos guían son la conservación de la energía relativista total, la conservación del impulso y la conservación de la carga. De estas leyes de conservación no es difícil demostrar que un fotón no puede simplemente desaparecer en el espacio vacío creando un par al momento que desaparece. La presencia de un núcleo masivo (el cual puede absorber impulso sin afectar apreciablemente el balance de energía) es necesaria para permitir que tanto la energía como el impulso se conserven en el proceso. La carga se conserva automáticamente ya que el fotón no tiene carga y el par de partículas creadas no tienen carga neta. De la ecuación 2-15 se ve que la energía mínima, o umbral, necesaria para que un fotón cree un par es $2m_0c^2$ o 1.02 MeV ($1 \text{ MeV} = 10^6 \text{ eV}$), lo cual es una longitud de onda 0.012 \AA . Si la longitud de onda es menor que ésta, correspondiendo a una energía mayor que el valor umbral, el fotón crea el par con energía cinética y con energía en reposo. El fenómeno de producción de pares es un fenómeno de alta energía, los fotones pertenecen a las regiones de rayos X cortos o rayos γ en el espectro electromagnético (ver figura 2-4), región en la cual las energías son iguales o mayores que $2m_0c^2$. Como se verá en la siguiente sección, los resultados experimentales demuestran que la absorción de fotones en la interacción con la materia ocurre principalmente mediante el proceso fotoeléctrico para energías bajas, por el efecto Compton para energías medias y mediante producción de pares para energías altas.

Los pares electrón-positrón se producen en la naturaleza por fotones de los rayos cósmicos y en el laboratorio por fotones del bremsstrahlung provenientes de los aceleradores de partículas

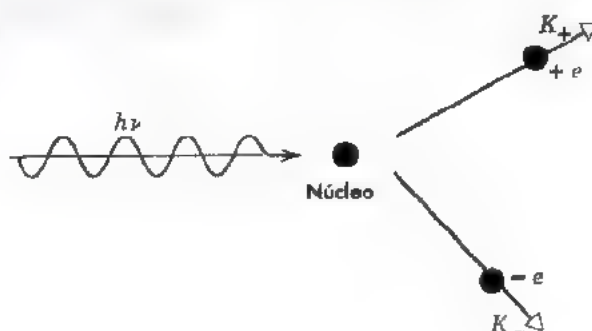


FIGURA 2-12

Proceso de producción de pares.

También se pueden producir otros pares de partículas tales como el protón y antiprotón si el fotón inicial tiene la energía suficiente. Debido a que el electrón y el positrón tienen la masa en reposo más pequeña entre las partículas conocidas, la energía umbral de su producción es la menor. Los experimentos demuestran la descripción cuántica del proceso de producción de pares, mientras que no existe explicación satisfactoria de este fenómeno en la teoría clásica.

Ejemplo 2-6. El análisis de una fotografía de una cámara de burbujas revela la creación de un par electrón-positrón cuando los fotones pasan a través de la materia. Las trazas del electrón y del positrón tienen curvaturas opuestas en el campo magnético uniforme B de 0.20 weber/m² y sus radios r son de 2.5×10^{-2} m. ¿Cuál era la energía y longitud de onda del fotón productor del par?

El impulso p del electrón está dado por

$$\begin{aligned} p &= eBr = 1.6 \times 10^{-19} \text{ coul} \times 2.0 \times 10^{-1} \text{ weber/m}^2 \times 2.5 \times 10^{-2} \text{ m} \\ &= 8.0 \times 10^{-22} \text{ kg-m/seg} \end{aligned}$$

Su energía relativista total está dada por

$$E^2 = c^2 p^2 + (m_0 c^2)^2$$

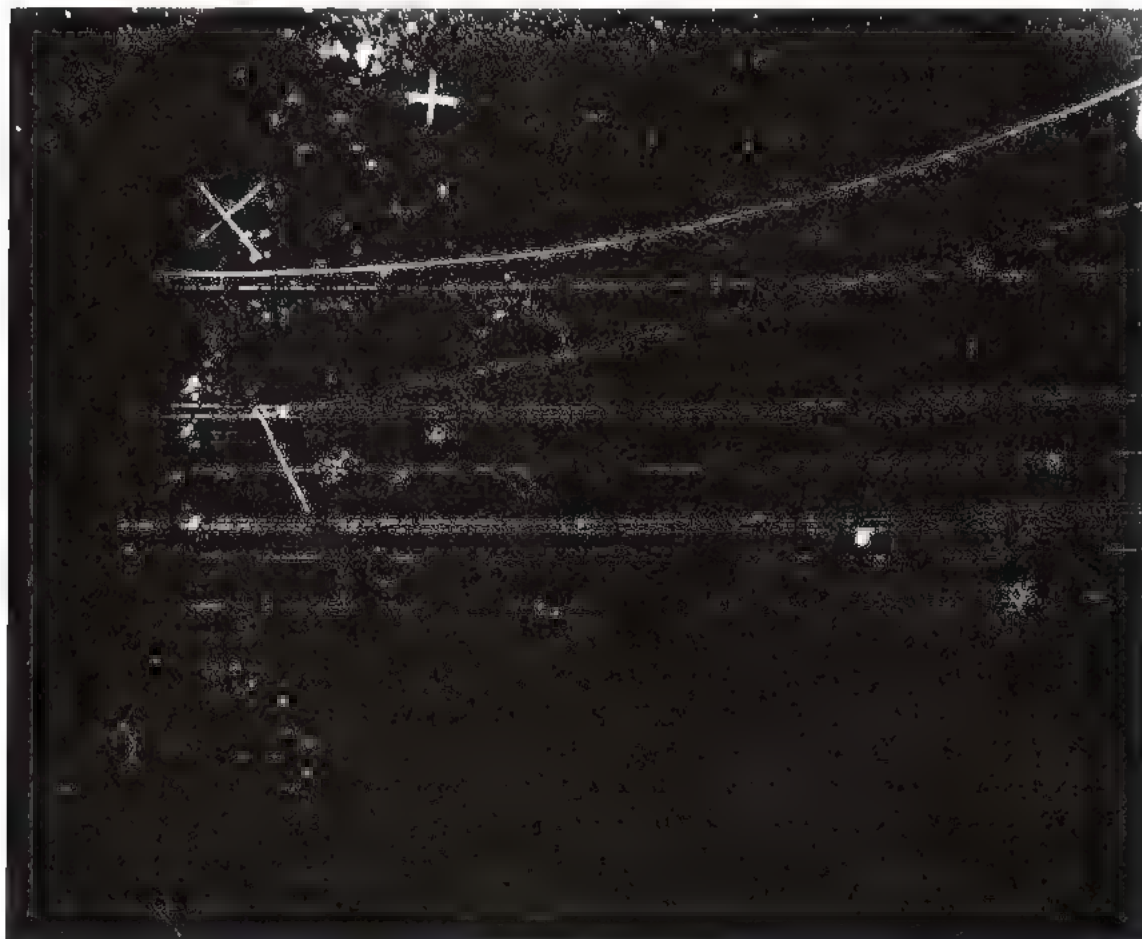


FIGURA 2-13

Producción de un par de electrones vistos en una cámara de burbujas. Las trazas del electrón y del positrón son las dos espirales que se tocan en el punto en el que tiene lugar la producción en el líquido que llena la cámara. El estudiante puede determinar cuál de las dos espirales pertenece al positrón sabiendo que las trazas largas son inicialmente deuterones cargados positivamente y que inciden desde la izquierda. (Cortesía de C. R. Sun, Universidad Estatal de Nueva York en Albany).

Puesto que $m_0c^2 = 0.51 \text{ MeV}$ y $pc = 8.0 \times 10^{-22} \text{ kg-m/seg} \times 3.0 \times 10^8 \text{ m/seg} = 2.4 \times 10^{-13} \text{ joule} = 1.5 \text{ MeV}$, se tiene $E^2 = (1.5 \text{ MeV})^2 + (0.51 \text{ MeV})^2$ y $E = 1.6 \text{ MeV}$.

La energía relativista total del positrón tenía el mismo valor puesto que su traza tenía el mismo radio, de modo que la energía del fotón era

$$h\nu = E_- + E_+ = 3.2 \text{ MeV}$$

La longitud de onda del fotón se sigue de

$$E = h\nu = hc/\lambda$$

o

$$\lambda = \frac{hc}{E} = \frac{6.6 \times 10^{-34} \text{ joule-sec} \times 3.0 \times 10^8 \text{ m/seg}}{3.2 \times 10^6 \text{ eV} \times 1.6 \times 10^{-19} \text{ joule/eV}} = 3.9 \times 10^{-13} \text{ m} = 0.0039 \text{ Å}$$

Intimamente relacionado con la producción de pares está el proceso inverso llamado aniquilación de pares. Un electrón y un positrón los cuales están inicialmente en reposo y cerca entre sí, se unen y se aniquilan. La materia desaparece y en su lugar se tiene energía radiante. Puesto que el impulso inicial del sistema es cero y el impulso se debe conservar en el proceso, no es posible tener un solo fotón creado ya que un solo fotón no puede tener impulso cero. El proceso más probable es la creación de dos fotones moviéndose con impulsos iguales pero en dirección opuesta. Menos probable, pero posible, es la creación de tres fotones.

En el proceso de dos fotones ilustrado por la figura 2-14, la conservación del impulso da $0 = P_1 + P_2$ ó $P_1 = -P_2$ de modo que los impulsos de los fotones son opuestos en dirección pero iguales en magnitud. Entonces $p_1 = p_2$ o $h\nu_1/c$ y $\nu_1 = \nu_2 = \nu$. Por lo tanto, la conservación de la energía relativista total requiere que $m_0c^2 + m_0c^2 = h\nu + h\nu$, el positrón y el electrón no tienen energía cinética inicial y las energías de los fotones son las mismas. En consecuencia, $h\nu = m_0c^2 = 0.51 \text{ MeV}$, correspondiendo a un fotón de longitud de onda de 0.024 Å . Si el par inicial tuviera alguna energía cinética, entonces la energía del fotón excedería los 0.51 MeV y su longitud de onda debería ser menor que 0.024 Å .

En el proceso de producción de pares se crean los positrones, los cuales al pasar a través de la materia pierden energía en colisiones sucesivas hasta que se combinan con un electrón para formar un sistema ligado llamado *positronio*. El "átomo" positronio es de vida corta decayendo en fotones a los 10^{-10} segundos de su formación. Supuestamente, el electrón y el positrón se mueven alrededor de su centro de masa común en una especie de danza de la muerte antes de su aniquilación mutua.

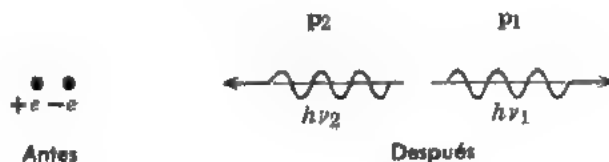
Ejemplo 2-7. (a) Supóngase que la figura 2-14 representa el proceso de aniquilación en un sistema de referencia S en el cual el par electrón-positrón está en reposo y los dos fotones de la aniquilación moviéndose a lo largo del eje x . Encontrar la longitud de onda λ de estos fotones en términos de m_0 , la masa en reposo de un electrón o positrón.

Se ha visto que p_1 es igual a p_2 y $h\nu_1$ igual a $h\nu_2$. Cada uno de los fotones tiene la misma energía, la misma frecuencia y la misma longitud de onda. Por lo tanto se pueden suprimir los subíndices, y de las relaciones $h\nu = m_0c^2$ y $p = E/c$ se obtiene

$$p = E/c = h\nu/c = m_0c^2/c = m_0c$$

FIGURA 2-14

Aniquilación de un par que produce dos fotones.



Pero también se tiene la relación

$$p = h/\lambda$$

de modo que

$$\lambda = h/p = h/m_0c$$

Por lo tanto, en el sistema en el cual el átomo positronio está en reposo cada uno de los fotones tiene la misma longitud de onda $\lambda = h/m_0c$.

(h) Considérese ahora el mismo evento de aniquilación observado en el sistema S' , que se mueve en relación a S con una velocidad v y hacia la izquierda. ¿Qué longitud de onda asignará este observador (móvil) a los fotones de aniquilación?

Aquí, inicialmente el par tiene la energía total relativista $2mc^2$, donde m es la masa relativista, en vez de tener solamente la energía con masa en reposo $2m_0c^2$, así que la conservación de la energía en el proceso de aniquilación conduce a

$$2mc^2 = p'_1c + p'_2c$$

Al mismo tiempo, ahora el par se mueve con velocidad v a lo largo de la dirección positiva del eje x' de modo que su impulso inicial es $2mv$ en vez de ser cero como antes. Ahora la conservación del impulso produce

$$2mv = p'_1 - p'_2$$

y los fotones se mueven en direcciones opuestas a lo largo del eje x' . Combinando estas dos expresiones, multiplicando la segunda por c y sumándola a la primera se obtiene,


$$p'_1 = m(c + v) = \frac{m_0(c + v)}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} = m_0c \sqrt{\frac{c + v}{c - v}}$$

Considerando que $p'_1 = h/\lambda'_1$, así que

$$\lambda'_1 = \frac{h}{p'_1} = \frac{h}{m_0c} \sqrt{\frac{c - v}{c + v}} = \lambda \sqrt{\frac{c - v}{c + v}} \quad (2-16a)$$

De manera similar, restando la segunda ecuación de la primera, se obtiene

$$\lambda'_2 = \frac{h}{p'_2} = \frac{h}{m_0c} \sqrt{\frac{c + v}{c - v}} = \lambda \sqrt{\frac{c + v}{c - v}} \quad (2-16b)$$

Los fotones *no* tienen la misma longitud de onda, pero se *corren por efecto Doppler* de una longitud de onda λ que tenían en el sistema en reposo de la fuente (el átomo positronio). Si un observador está situado en el eje x de manera que la fuente se mueve *hacia él*, recibirá el fotón 1 con una frecuencia *mayor* que la frecuencia en "reposo". Si un observador está situado en el eje x' de tal modo que la fuente se mueve *alejándose de él*, recibirá el fotón 2 con una frecuencia *menor* que la frecuencia en reposo. En realidad, este ejemplo es una derivación de la fórmula del *corrimiento Doppler longitudinal* de la teoría de la relatividad. 

La primera evidencia experimental del proceso de producción de pares y de la existencia de los positrones fue obtenida por Anderson en 1933 mientras investigaba la radiación cósmica. Esta radiación consiste en un flujo de fotones con gran contenido energético y partículas cargadas que inciden sobre la tierra provenientes de fuentes extraterrestres. Anderson utilizó una cámara de niebla que contenía una placa delgada de plomo, encontrándose todo el aparato en un campo magnético. Al exponer este aparato a la radiación cósmica se encontró que de una manera irregular salían desde algún punto de la placa de plomo un par de partículas cargadas. Se supuso que estos eventos eran el resultado de la interacción de un fotón con el plomo ya que no se había visto que una partícula cargada incidiera en el punto de expulsión.

mientras que un fotón por no poseer carga podría haber incidido en el punto de expulsión sin ser visto. Las dos partículas cargadas expulsadas en estos eventos eran desviadas por el campo magnético en direcciones opuestas, de tal manera que sus cargas eran de signo opuesto. De otras consideraciones se puede mostrar que las magnitudes de estas cargas son igual a una carga electrónica y que las masas de las partículas son aproximadamente igual a una masa electrónica.

El descubrimiento del proceso de la producción de pares vino a explicar el origen de una discrepancia entre la, entonces usual, teoría de la atenuación de los rayos X y las medidas de los coeficientes de atenuación para los rayos X de 2.6 MeV (rayos obtenidos de una fuente radiactiva) por diversos materiales. Como originalmente la teoría no incluía la producción de pares, la atenuación predicha era muy pequeña; con la inclusión del proceso de la producción de pares el acuerdo que se obtiene entre la teoría y el experimento es bueno. Sin embargo, la importancia real del descubrimiento de Anderson radica en la preciosa confirmación que éste vino a dar a la teoría relativista mecánico-cuántica del electrón de Dirac.

La teoría de Dirac conduce a la predicción de que los valores permitidos de la energía relativista total E para un electrón libre son

$$E = \pm \sqrt{c^2 p^2 + (m_0 c^2)^2} \quad (2-17)$$

donde m_0 es la masa en reposo del electrón. Estos valores son simplemente las soluciones para E de la ecuación (2-6), pero la solución con el signo menos corresponde a una energía total relativista negativa, concepto tan advenedizo para la mecánica relativista como lo es la energía total negativa para la mecánica clásica. En vez de desechar la parte negativa sobre la base de su falta de realidad física, Dirac escudriñó las consecuencias de la ecuación completa y al hacerlo llegó a algunas conclusiones muy interesantes. Considérese la figura 2-15 que es un diagrama de niveles de energía que representa la ecuación (2-17). Si existe el espectro continuo de niveles de energía que se indica, todos los electrones libres de energía positiva estarían disponibles para realizar transiciones entre estos niveles, transiciones acompañadas por la emisión de fotones con las energías apropiadas: esto obviamente no concuerda con el experimento, debido a que por lo general no se observa que electrones libres emitan espontáneamente fotones de energía $h\nu \geq 2m_0 c^2$. Sin embargo, Dirac señaló que se puede superar esta dificultad si se supone que todos los niveles de energía negativa están llenos normalmente en todos los puntos del espacio. De acuerdo con esta suposición, un vacío consiste de un mar de electrones en niveles de energía negativa. Esto sí concuerda con el experimento. Por ejemplo, la carga negativa no podría ser detectada si se la supone uniformemente distribuida y por lo tanto no ejercería fuerza sobre un cuerpo cargado. Consideraciones similares demostrarán que todas las propiedades "usuales" de un mar de electrones de energía negativa son tales que su presencia no sería aparente en ninguno de los experimentos usuales. Empero, la teoría de Dirac del vacío

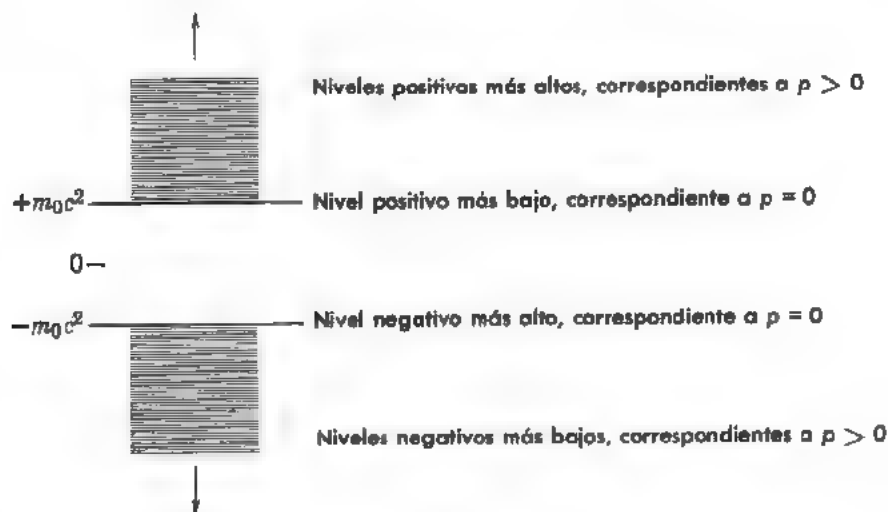


FIGURA 2-15

Niveles de energía de un electrón libre según la teoría de Dirac.

no es completamente vacía, a que predice ciertas propiedades nuevas que pueden comprobarse por el experimento.

El diagrama de niveles de energía para un electrón libre sugiere la posibilidad de excitar un electrón que se encuentra en un nivel de energía negativa mediante la absorción de un fotón. Puesto que todos los niveles de energía negativa se consideran totalmente ocupados, el electrón deberá ser excitado a uno de los niveles de energía positiva desocupados. Obviamente, la energía mínima necesaria para este proceso es $h\nu = 2m_0c^2$ y el resultado del proceso es la producción de un electrón en un nivel de energía positiva más un agujero en un nivel de energía negativa. Se puede demostrar que un agujero en un nivel de energía negativa tiene todas las propiedades mecánicas y ópticas de un positrón de energía positiva. Por ejemplo, existe una carga positiva $+e$ asociada con la ausencia de un electrón con carga negativa $-e$. Consecuentemente, este es el proceso de producción de pares observado experimentalmente por Anderson tres años después de que fuera predicho teóricamente por Dirac.

2.8 Secciones transversales para absorción y dispersión de fotones

Considérese, como en la figura 2-16 un haz paralelo de fotones que se pasan a través de una placa material. Los fotones pueden interactuar con los átomos de la placa mediante cuatro procesos diferentes: fotoeléctrico, producción de pares, Thomson y Compton. En los dos primeros los fotones se absorben completamente, mientras que en los dos últimos sólo son dispersados, pero en todos los procesos ocurre la eliminación de fotones del haz. La pregunta de qué tan probable es que estos procesos ocurran, para un conjunto de circunstancias dadas, es una de las preguntas de gran importancia tanto teóricas como prácticas. Por ejemplo, para un físico médico es muy importante diseñar el blindaje para una máquina de rayos X, o para un ingeniero nuclear diseñar el blindaje para un reactor. La respuesta a esta pregunta se expresa en términos de las cantidades llamadas secciones transversales. En este libro las secciones transversales aparecen primero en conexión con los fotones pero posteriormente aparecerán en conexión con otras cosas.

La probabilidad de que un fotón de una energía dada sea, por ejemplo, absorbido en un proceso fotoeléctrico al pasar por un átomo de la placa queda especificada por el valor de la *sección transversal* fotoeléctrica σ_{PE} . Esta medida de la probabilidad de ocurrencia del proceso fotoeléctrico se define de modo que el número N_{PE} de absorciones fotoeléctricas que ocurren es

$$N_{PE} = \sigma_{PE} I n \quad (2-18)$$

cuando un haz que contiene I fotones incide sobre una placa cortada que contiene n átomos por unidad de área. Aquí se supone que la placa es lo suficientemente delgada como para que la

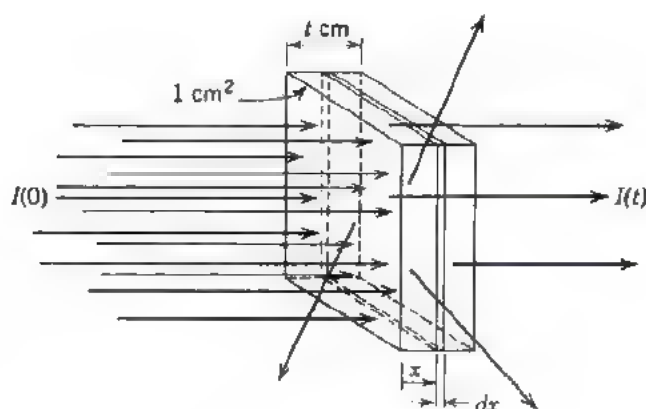


FIGURA 2-16

Haz de fotones atravesando una lámina.

probabilidad de que un fotón dado sea absorbido al pasar por la placa sea mucho menor que la unidad.

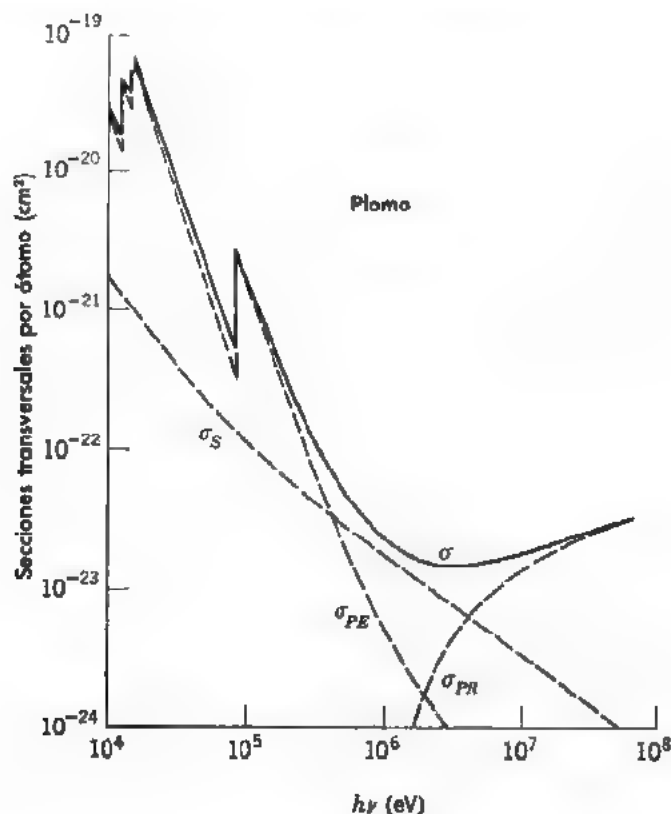
La definición de (2-18), que es un prototipo de las definiciones de todas las secciones transversales, es suficientemente importante para garantizar una interpretación física prudente. Obsérvese primero que el número N_{PE} de absorción en efecto debería incrementarse en proporción al número I de fotones que inciden sobre la placa. Además, si la placa es delgada en el sentido en el que se especificó anteriormente, los átomos en la placa no se "ensombrecerán" entre sí, por lo que toca a los fotones incidentes. Entonces, el número N_{PE} de absorciones también se incrementará en proporción al número n de átomos blanco por unidad de área de la placa; por lo que se tendrá

$$N_{PE} \propto I n$$

Si esta proporcionalidad se escribe como una igualdad en la que a la constante de proporcionalidad se la denota por σ_{PE} , se obtiene la ecuación que define la sección transversal. Por lo tanto se ve que la sección transversal cuyo valor depende tanto de la energía del fotón como del tipo de átomo, es una medida de cuán efectivos son esos átomos para absorber los fotones mediante el efecto fotoeléctrico. Puesto que las cantidades N_{PE} e I en la ecuación 2-18 son adimensionales mientras que n tiene dimensiones de $(\text{área})^{-1}$, es claro que σ_{PE} deberá tener dimensiones de (área). Por lo tanto, resulta razonable usar el nombre de sección transversal para σ_{PE} . Casi es posible dar una interpretación geométrica si se imagina un círculo de área σ_{PE} centrado en cada átomo en la placa con la propiedad de que cualquier fotón que entre a esta placa circular es absorbido por el átomo mediante el efecto fotoeléctrico. Esta interpretación geométrica resulta conveniente para la visualización y aún para los cálculos pero definitivamente no deberá considerarse literalmente cierta. En realidad una sección transversal es simplemente una forma de expresar numéricamente la probabilidad de que cierto tipo de átomos origine un fotón de una energía dada para que realice un proceso particular. Las definiciones e interpretaciones de las secciones transversales para los otros procesos de absorción o dispersión son completamente análogas a las que se han considerado en este ejemplo.

La figura 2-17 muestra las secciones transversales de dispersión (σ_S), producción de pares (σ_{PR}), fotoeléctrica (σ_{PE}), y total (σ) medidas para un átomo de plomo como una función de la energía $h\nu$ del fotón. La sección transversal de dispersión especifica la probabilidad de que la dispersión ocurra por cualquiera de los procesos Thomson y Compton. Para el plomo que tiene un número atómico grande y por lo tanto electrones atómicos fuertemente ligados la dispersión Thomson domina sobre la dispersión Compton cuando la energía del fotón está por debajo de $h\nu = 10^5$ eV. El rompimiento brusco en la sección transversal fotoeléctrica ocurre para las energías de enlace de los diferentes electrones en el átomo de plomo; cuando $h\nu$ cae por debajo de la energía de enlace de un electrón particular ya no es posible energéticamente un proceso fotoeléctrico en el que él intervenga. La sección transversal para producción de pares crece muy rápidamente desde cero cuando $h\nu$ excede la energía umbral $2m_0c^2 \approx 10^6$ eV necesaria para materializar el par. En la figura 2-17 la sección transversal total σ es la suma de las secciones transversales de dispersión, fotoeléctrica y de producción de pares; esta cantidad especifica la probabilidad de que un fotón tenga cualquier tipo de interacción con el átomo. De la figura se pueden ver los intervalos de valores de la energía en los cuales cada uno de los tres procesos hace su contribución más importante, para el caso del plomo:

Efecto fotoeléctrico:	$h\nu < 5 \times 10^5 \text{ eV}$
Dispersión:	$5 \times 10^5 \text{ eV} < h\nu < 5 \times 10^6 \text{ eV}$
Producción de pares:	$5 \times 10^6 \text{ eV} < h\nu$

**FIGURA 2-17**

Secciones transversales de dispersión, fotoeléctrica, de producción de pares y total para un átomo de plomo.

Debido a que estos procesos tienen probabilidades diferentes dependiendo del número atómico, los intervalos de energía en los cuales ellos dominan son muy distintos para átomos con número atómico bajo. Para el aluminio, los intervalos de energía son aproximadamente:

Efecto fotoeléctrico: $h\nu < 5 \times 10^4 \text{ eV}$

Dispersión. $5 \times 10^4 \text{ eV} < h\nu < 1 \times 10^7 \text{ eV}$

Producción de pares: $1 \times 10^7 \text{ eV} < h\nu$

Ejemplo 2-8. Evaluar la atenuación de un haz de rayos X paralelos al pasar a través de una placa gruesa de materia en términos de la sección transversal total.

Con referencia a la figura 2-16, cuando el haz incide sobre la cara frontal de la placa de espesor t el número de fotones en el haz es $I(0)$ y la sección cortada contiene ρ átomos por cm^3 . Supóngase, por simplicidad, que el área de la sección cortada es de 1 cm^2 . Debido a los procesos de dispersión y absorción, el haz paralelo contiene un número pequeño $I(x)$ de fotones después de haber penetrado en la sección cortada $x \text{ cm}$. Considérese una lámina delgada de la placa de espesor dx y localizada en x . El número de átomos por cm^2 en la lámina es ρ veces su volumen dx o ρdx . En una definición análoga a (2-18), el número de fotones del haz que serán dispersados o absorbidos en la lámina está especificado por la sección transversal total σ y es $\sigma I(x) \rho dx$. De esta manera, el número de fotones del haz que salen de la lámina, $I(x + dx)$, que es igual al número incidente menos el número que se ha perdido, es

$$I(x + dx) = I(x) - \sigma I(x) \rho dx$$

$$dI(x) \equiv I(x + dx) - I(x) = -\sigma I(x) \rho dx$$

Para encontrar el número $I(t)$ de fotones que salen por la cara posterior de la placa se despeja $dI(x)/I(x)$ y se integra sobre x

$$\begin{aligned}\frac{dI(x)}{I(x)} &= -\sigma_p dx \\ \int_0^t \frac{dI(x)}{I(x)} &= -\sigma_p \int_0^t dx \\ \ln I(x) \Big|_0^t &= -\sigma_p t \\ \ln \frac{I(t)}{I(0)} &= -\sigma_p t \\ \frac{I(t)}{I(0)} &= e^{-\sigma_p t} \\ I(t) &= I(0)e^{-\sigma_p t}\end{aligned}\tag{2-19}$$

La intensidad del haz, medida por el número I de fotones que contiene, decrece exponencialmente conforme el espesor t de la placa aumenta. La cantidad σ_p , llamada *coeficiente de atenuación*, tiene dimensiones de (cm^{-1}) y es el recíproco del espesor de la placa necesario para atenuar la intensidad del haz por un factor e . A este espesor se le llama la *longitud de atenuación* Λ y es

$$\Lambda = 1/\sigma_p \tag{2-20}$$

Por supuesto, el coeficiente de atenuación tiene la misma dependencia con la energía del fotón que la sección transversal total. La figura 2-18 muestra medidas de los coeficientes de atenuación para el plomo, el estaño y el aluminio para fotones de energía relativamente alta.

Esta sección resume muchos de los aspectos prácticos de los fenómenos de emisión y absorción de radiación electromagnética que se han estudiado en este capítulo. Pero los aspectos fundamentales de estos fenómenos se resumen mejor afirmando que demuestran que la radiación electromagnética está cuantizada en partículas energéticas llamadas fotones. También deberá darse énfasis al hecho de que los fenómenos de interferencia y difracción demuestran que los fotones no viajan desde un sistema en el que son emitidos hasta donde son absorbidos en la forma simple en la que lo hacen las partículas clásicas: sino que los fotones actúan como si fueran guiados por ondas clásicas debido a que al viajar a través de un sistema, tal como un aparato de difracción, quedan mejor descritos por ondas clásicas que se propagan en dicho aparato.

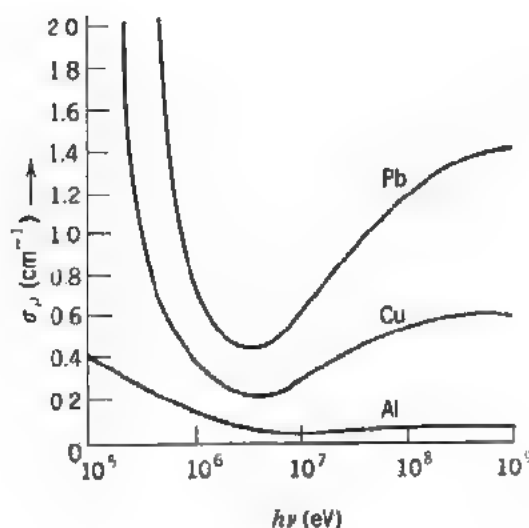


FIGURA 2-18

Coeficientes de atenuación para distintos átomos para un intervalo de energía del fotón.

PREGUNTAS

1. En los experimentos de efecto fotoeléctrico, la corriente (número de electrones emitidos por unidad de tiempo) es proporcional a la intensidad de la luz. ¿Se puede usar solamente este resultado para distinguir entre las teorías clásica y cuántica?
2. ¿Por qué en la figura 2-2 la corriente fotoeléctrica no aumenta verticalmente hacia su máximo valor (saturación) cuando la diferencia de potencial aplicada es ligeramente más positiva que $-V_0$?
3. ¿Por qué, aun cuando la radiación incidente es monocromática los fotoelectrones son emitidos con una gama de velocidades?
4. A la existencia de una frecuencia de corte en el efecto fotoeléctrico se le considera con frecuencia como la objeción más fuerte a la teoría ondulatoria. Explique.
5. ¿Por qué las mediciones en el efecto fotoeléctrico son muy sensibles a la superficie fotoeléctrica?
6. ¿Los resultados de los experimentos fotoeléctricos invalidan el experimento de interferencia de Young?
7. ¿Se puede utilizar el artificio de hacer $h \rightarrow 0$ para obtener los resultados clásicos a partir de los cuánticos en el caso del efecto fotoeléctrico? Explique.
8. Suponga que la emisión de fotones desde una fuente de radiación es caótica en dirección. ¿Podría esperar que la intensidad (o la densidad de energía) variara inversamente al cuadrado de la distancia de la fuente en la teoría de los fotones como ocurre en la teoría ondulatoria?
9. ¿Tiene masa un fotón de energía E ? Si es así, evalúela.
10. ¿Por qué en la dispersión de Compton podría Ud. esperar que $\Delta\lambda$ fuera independiente de los materiales que componen al dispersor?
11. ¿Cuándo esperaría Ud. observar más fácilmente el efecto Compton con blancos dispersores compuestos por átomos con número atómico grande o con átomos con número atómico bajo? Explique.
12. ¿Se observa el efecto Compton con luz visible? ¿Por qué?
13. De la teoría electromagnética clásica, ¿esperaría un mínimo definido en la longitud de onda de la radiación emitida cuando el valor de la energía de un electrón incidente sobre un blanco de un tubo de rayos X está dado?
14. Un tubo de televisión, ¿emite rayos X? Explique.
15. ¿Qué efecto(s) produce, sobre el espectro de rayos X resultante, el decremento del voltaje del tubo?
16. Analizar el proceso de bremsstrahlung como el inverso del proceso Compton y como el inverso del proceso fotoeléctrico.
17. Describir varios métodos que se pueden utilizar para determinar experimentalmente el valor de la constante de Planck (h).
18. ¿De qué factores esperaría Ud. juzgar si un fotón pierde su energía en la interacción con la materia por proceso fotoeléctrico, por proceso Compton o por proceso de producción de pares?
19. ¿Puede Ud. dar evidencia experimental que contradiga la idea de que el vacío es un mar de electrones en estados de energía negativa?
20. ¿Puede ocurrir una aniquilación electrón-positrón con la creación de un fotón, si existe un núcleo cercano disponible para compensar el impulso?

21. Explique cómo es posible la aniquilación de pares con la creación de *tres* fotones. En principio, ¿es posible crear más de tres fotones en un sólo proceso de aniquilación?
22. ¿Cuál sería el proceso inverso al de la creación de dos fotones en una aniquilación electrón-positrón? ¿Puede ocurrir esto? ¿Es fácil que ocurra?
23. ¿Qué hay de malo en tomar la interpretación geométrica de sección transversal literalmente?

PROBLEMAS

1. (a) La energía necesaria para extraer un electrón del sodio es 2.3 eV. ¿El sodio presentará efecto fotoeléctrico para luz amarilla con $\lambda = 5890 \text{ \AA}$? ¿Cuál es la longitud de onda de corte para emisión fotoeléctrica de sodio?
2. Sobre una superficie de aluminio incide luz de longitud de onda 2000 \AA . Se requieren 4.2 eV para extraer un electrón del aluminio. ¿Cuál será la energía cinética del (a) más rápido y (b) más lento de los fotoelectrones emitidos? (c) ¿Cuál será el potencial de frenamiento? (d) ¿Cuál es la longitud de onda de corte para el aluminio? (e) Si la intensidad de la luz incidente es 2.0 W/m^2 , ¿cuál es el número promedio de fotones por unidad de tiempo por unidad de área que inciden sobre la superficie?
3. La función trabajo para una superficie de litio limpia es 2.3 eV. Haga una gráfica esquemática del potencial de frenamiento V_0 contra la frecuencia de la luz incidente para esta superficie, indicando los puntos importantes.
4. El potencial de frenamiento para fotoelectrones emitidos desde una superficie iluminada con luz de longitud de onda $\lambda = 4910 \text{ \AA}$ es 0.71 V. cuando se cambia la longitud de onda incidente, se encuentra que el potencial de frenamiento es 1.43 V. ¿Cuál es la nueva longitud de onda?
5. En un experimento fotoeléctrico en el cual se utilizan luz monocromática y un fotocátodo de sodio, se encuentra un potencial de frenamiento de 1.85 V para $\lambda = 3000 \text{ \AA}$ y 0.82 V para $\lambda = 4000 \text{ \AA}$. A partir de estos datos determine (a) Un valor para la constante de Planck, (b) la función trabajo en electrón-volts para el sodio y (c) la longitud de onda umbral para el sodio.
6. Considere luz incidiendo sobre una placa fotográfica. La luz será registrada si disocia una molécula de AgBr en la placa. La energía mínima para disociar esta molécula es del orden de 10^{-19} joules. Evaluar la máxima longitud de onda de corte para la cual la luz no sería registrada.
7. Si se quieren evitar errores mayores que el 1% cuando en el efecto fotoeléctrico intervienen electrones con $v/c > 0.1$, se deberá usar la expresión relativista para la energía cinética. Para fotoelectrones extraídos de una superficie de aluminio ($w_0 = 4.2 \text{ eV}$) ¿Cuál es la longitud de onda menor de un fotón incidente para el cual se puede utilizar la expresión clásica?
8. Rayos X con $\lambda = 0.71 \text{ \AA}$ extraen fotoelectrones de una hoja de oro. Los electrones describen trayectorias circulares de radio r en una región de inducción magnética B . Los experimentos muestran que $rB = 1.88 \times 10^{-4} \text{ Tesla-m}$. Encontrar (a) la energía cinética máxima de los fotoelectrones y (b) el trabajo hecho en remover un electrón de la hoja de oro.
9. (a) Demostrar que un electrón libre no puede absorber un fotón y conservar en el proceso tanto la energía como el impulso. En consecuencia, el proceso fotoeléctrico requiere un electrón ligado. (b) Sin embargo, en el efecto Compton el electrón *puede* ser libre. Explique.
10. Bajo condiciones normales el ojo humano registrará una sensación visual a 5500 \AA si cuando menos se absorben 100 fotones por segundo. ¿Cuál es el nivel de potencia equivalente?
11. La radiación solar cae sobre la tierra a razón de $1.94 \text{ cal/cm}^2\text{-min}$ sobre una superficie normal a los rayos incidentes. ¿Cuál es el equivalente en fotones por $\text{cm}^2\text{-min}$, si se supone una longitud de onda promedio de 5500 \AA ?

12. ¿Cuáles son la frecuencia, longitud de onda e impulso de un fotón cuya energía es igual a la energía de masa en reposo de un electrón?
13. Dentro de la descripción de la radiación en términos de fotones, demostrar que si haces de radiación de dos longitudes de onda diferentes tienen la misma intensidad (o densidad de energía), entonces los números de fotones por unidad de área transversal por segundo en los haces están en la misma relación que las longitudes de onda.

14. Derivar la relación

$$\cot \frac{\theta}{2} = \left(1 + \frac{h\nu}{m_0 c^2} \right) \tan \varphi$$

entre la dirección de movimiento del fotón dispersado y el electrón de retroceso en el efecto Compton.

15. Derivar una relación entre la energía cinética K del electrón de retroceso y la energía E del fotón incidente en el efecto Compton. Una forma de la relación es

$$\frac{K}{E} = \frac{\left(\frac{2h\nu}{m_0 c^2} \right) \sin^2 \frac{\theta}{2}}{1 + \left(\frac{2h\nu}{m_0 c^2} \right) \sin^2 \frac{\theta}{2}}$$

(Sugerencia: véase ejemplo 2-4.)

16. Sobre electrones libres inciden fotones de longitud de onda 0.024 \AA . (a) Encontrar la longitud de onda de un fotón que es dispersado a 30° de la dirección incidente y la energía cinética suministrada al electrón de retroceso. (b) Repetir el cálculo si el ángulo de dispersión es 120° . (Sugerencia: véase ejemplo 2-4).
17. Un fotón de rayos X de energía inicial $1.0 \times 10^5 \text{ eV}$ que viaja en la dirección positiva del eje x , incide sobre un electrón libre y en reposo. El fotón es dispersado a ángulo recto en la dirección positiva del eje y . Encontrar las componentes del impulso del electrón de retroceso.
18. (a) Demostrar que el cambio fraccional en la energía del fotón en el efecto Compton $\Delta E/E$, es igual a $(h\nu'/m_0 c^2)(1 - \cos \theta)$. (b) Graficar $\Delta E/E$ contra θ e interpretar físicamente la curva.
19. ¿Cuál es la energía cinética máxima posible de un electrón de retroceso de Compton en términos de la energía $h\nu$ del fotón incidente y de la energía en reposo del electrón $m_0 c^2$?
20. Determinar el corrimiento máximo en longitud de onda en la dispersión Compton de fotones por protones.
21. (a) Demostrar que la longitud de onda de corte en la parte baja del espectro continuo de rayos X está dada por $\lambda_{\min} = 12.4 \text{ \AA}/V$, donde V es el voltaje aplicado en kilovolts. (b) ¿Cuál es la λ_{\min} si el voltaje a través de un tubo de rayos X es 186 KV ?
22. (a) ¿Cuál es el voltaje mínimo a través de un tubo de rayos X que producirá un rayo X con la longitud de onda de Compton? ¿Una longitud de onda de 1 \AA ? (b) ¿Cuál es el voltaje mínimo necesario a través de un tubo de rayos X si la radiación bremsstrahlung resultante es capaz de producir pares?
23. Un rayo γ crea un par electrón-positrón. Demostrar directamente que, sin la presencia de un tercer cuerpo que tome algo del impulso, no es posible la conservación simultánea del impulso y la energía. (Sugerencia: haga iguales las energías y demuestre que esto conduce a impulsos distintos antes y después de la interacción).
24. Un rayo γ puede producir un par electrón-positrón tanto en vecindades de un electrón en reposo como en las de un núcleo. Demostrar que en este caso la energía umbral es $4m_0 c^2$. (Sugerencia: no desprecie el retroceso del electrón original y suponga que las tres partículas se mueven juntas. También use el sistema de referencia del centro de masas).

25. Un par de partículas se produce de modo que el positrón está en reposo y el electrón tiene una energía cinética de 1.0 MeV moviéndose en la dirección de vuelo del fotón productor. (a) Despreciando la energía transferida al núcleo del átomo cercano, encontrar la energía del fotón incidente. (b) ¿Qué porcentaje del impulso del fotón se transfiere al núcleo?
26. Suponga que un par electrón-positrón se forma mediante un fotón que tiene la energía umbral para el proceso. (a) Calcular el impulso transferido al núcleo en el proceso. (b) Suponga que el núcleo es de un átomo de plomo y calcule la energía cinética del núcleo de retroceso. ¿Está justificado el despreciar esta energía en comparación con la energía umbral supuesta anteriormente?
27. Demostrar que los resultados del ejemplo 2-8, expresados en términos de p y t son válidos independientemente del área supuesta para la sección cortada.
28. Demostrar que la longitud de atenuación Λ es justamente igual a la distancia promedio que un fotón viaja antes de ser dispersado o absorbido.
29. Use los datos de la figura 2-17 para calcular el espesor de una lámina de plomo que atenúe por un factor 100 un haz de rayos X de 10 KeV.

Postulado de de Broglie

Propiedades ondulatorias de las partículas

3.1	Ondas de materia	81
	Postulado de de Broglie; longitud de onda de de Broglie; experimento de Davisson y Germer; experimento de Thompson; difracción de átomos de helio y neutrones.	
3.2	Dualidad onda-partícula	88
	Principio de complementaridad; interpretación de Einstein de la dualidad para la radiación; interpretación de Born de la dualidad para la materia; funciones de onda; principio de superposición.	
3.3	El principio de incertidumbre	91
	Enunciado del principio; interpretación; explicación de su origen físico según Bohr.	
3.4	Propiedades de las ondas de materia	95
	Velocidades de la onda y de grupo; igualdad de la velocidad de la partícula y la velocidad de grupo; dispersión de frecuencias y longitudes de onda recíprocas en un grupo de ondas; derivación del principio de incertidumbre a partir del postulado de de Broglie; amplitud de un estado cuántico.	
3.5	Algunas consecuencias del principio de incertidumbre	105
	Relación con la complementaridad; limitaciones impuestas a la mecánica cuántica.	

80 EL POSTULADO DE DE BROGLIE PROPIEDADES ONDULATORIAS DE LAS PARTICULAS Cap. 3

3.6 Filosofía de la teoría cuántica 106

Interpretación de Copenhague de Bohr y Heisenbergh; puntos de vista de Einstein y de de Broglie.

Preguntas 108

Problemas 109

Postulado de de Broglie

Propiedades ondulatorias de las partículas

3.1 Ondas de materia

Maurice de Broglie era un físico francés quien, desde un principio, apoyó el punto de vista de Compton sobre la naturaleza corpuscular de la radiación. Sus experimentos y estudios sobre los problemas filosóficos de la física de ese tiempo, impresionaron tanto a su hermano Louis, que éste cambió su carrera de historia a física. En 1924, Louis de Broglie propuso la existencia de ondas de materia en la tesis doctoral que presentó a la Facultad de Ciencias de la Universidad de París. Lo original y concienzudo de su tesis fue reconocido inmediatamente, sin embargo, sus ideas fueron consideradas como carentes de realidad física por su aparente falta de evidencias experimentales. Fue Albert Einstein quien reconoció su importancia y validez y atrajo hacia ella la atención de otros físicos. Cinco años después, de Broglie obtuvo el premio Nobel en física, cuando sus ideas fueron experimentalmente confirmadas en forma dramática.

La hipótesis de de Broglie consistía en que el comportamiento dual de la radiación, es decir, onda-partícula, debería ser igualmente aplicable a la materia. Así como el fotón tiene asociado una onda de luz que gobierna su movimiento, una partícula de materia (por ejemplo, un electrón) tiene asociada una onda de materia que gobierna su movimiento. Ahora bien, como el universo consiste en general, de radiación y materia, la sugerencia de de Broglie es esencialmente una afirmación acerca de una gran simetría de la naturaleza. En efecto, propuso que los aspectos ondulatorios de la materia están relacionados con los aspectos corpusculares en la misma forma cuantitativa que en el caso de la radiación. De acuerdo con de Broglie, tanto para la materia como para la radiación, la energía total E de un ente se relaciona con la frecuencia ν de la onda asociada a su movimiento por medio de la ecuación

$$E = h\nu \quad (3-1a)$$

y el impulso p del ente se relaciona con la longitud de onda λ de la onda asociada por la ecuación

$$p = h/\lambda \quad (3-1b)$$

En lo anterior, los conceptos corpusculares energía E , e impulso P , se relacionan con los conceptos ondulatorios frecuencia ν y longitud de onda λ a través de la constante de Planck h . A la ecuación (3-1b) escrita en la forma siguiente se le denomina *relación de de Broglie*.

$$\lambda = h/p \quad (3-2)$$

que predice la *longitud de onda de de Broglie* de una *onda de materia* asociada con el movimiento de una partícula material de impulso p .

Ejemplo 3-1. (a) ¿Cuál será la longitud de onda de de Broglie de una pelota de béis-bol que se mueve a una velocidad $v = 10 \text{ m/seg}$?

Suponga $m = 1.0 \text{ kg}$. De (3-2)

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{6.6 \times 10^{-34} \text{ joule-sec}}{1.0 \text{ kg} \times 10 \text{ m/seg}} = 6.6 \times 10^{-35} \text{ m} = 6.6 \times 10^{-25} \text{ \AA}$$

(b) ¿Cuál será la longitud de onda de un electrón cuya energía cinética es 100 eV ?

En este caso;

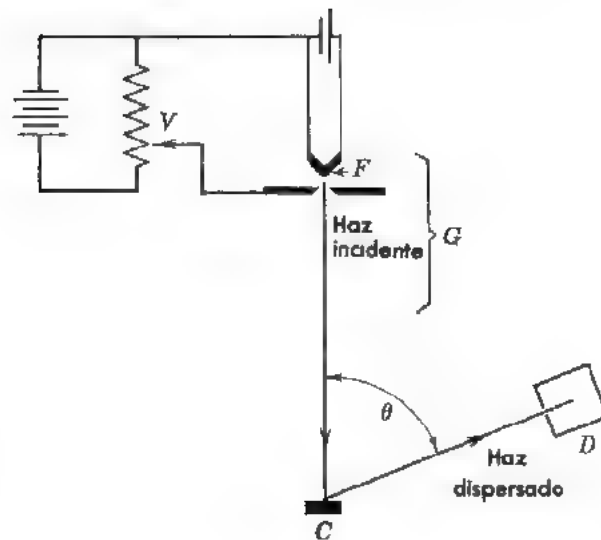
$$\begin{aligned} \lambda = \frac{h}{p} &= \frac{h}{\sqrt{2mK}} = \frac{6.6 \times 10^{-34} \text{ joule-sec}}{(2 \times 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg} \times 100 \text{ eV} \times 1.6 \times 10^{-19} \text{ joule/eV})^{1/2}} \\ &= \frac{6.6 \times 10^{-34} \text{ joule-sec}}{5.4 \times 10^{-24} \text{ kg-m/seg}} = 1.2 \times 10^{-10} \text{ m} = 1.2 \text{ \AA} \end{aligned}$$

En los experimentos de óptica geométrica, no se manifiesta la naturaleza ondulatoria de la propagación de la luz, ya que, las dimensiones importantes de los aparatos utilizados son muy grandes comparadas con la longitud de onda de la luz. Si se representa por a una dimensión característica de un aparato óptico (es decir, la amplitud de una lente; espejo o rendija) y λ es la longitud de onda de la luz que pasa por el aparato, se está en el dominio de la óptica geométrica siempre que $\lambda/a \rightarrow 0$. La razón es que los efectos de difracción en cualquier aparato siempre ocurren para ángulos de aproximadamente $\theta = \lambda/a$, de modo que los efectos de difracción son completamente despreciables cuando $\lambda/a \rightarrow 0$. Obsérvese que la óptica geométrica implica la propagación de rayos, que son similares a las trayectorias del movimiento de partículas clásicas.

Sin embargo, cuando la dimensión característica de un aparato óptico a se vuelve comparable con, o menor que, la longitud de onda λ de la luz que pasa por él, se está en el dominio de la óptica física. En este caso $\lambda/a \gtrsim 1$, y el ángulo de difracción $\theta = \lambda/a$ es suficientemente grande como para que los efectos de difracción sean fácilmente observables y la naturaleza ondulatoria de luz resulta aparente. Por lo tanto, para observar características ondulatorias, en el movimiento de materia, se requieren sistemas con aperturas u obstáculos adecuadamente pequeños. Los sistemas de aperturas, en la escala más fina, de que disponían los experimentadores contemporáneos de de Broglie, los constituirían los espacios entre planos de átomos adyacentes en un sólido, donde $a \simeq 1 \text{ \AA}$. (En la actualidad se dispone de sistemas que involucran dimensiones nucleares de $\sim 10^{-4} \text{ \AA}$). Considerando los resultados del ejemplo 3-1, se ve que no se puede esperar poder detectar *ningún* comportamiento ondulatorio en el movimiento de una pelota de béis-bol, donde $\lambda/a \simeq 10^{-25}$ para $a \simeq 1 \text{ \AA}$. Sin embargo, para una partícula material con una masa mucho menor que la de una pelota de béis-bol, el impulso p se reduce y la longitud de onda de de Broglie $\lambda = h/p$ crece lo suficiente como para que puedan observarse efectos de difracción. Utilizando aparatos con dimensiones características $a = 1 \text{ \AA}$, los aspectos ondulatorios en el movimiento del electrón con $\lambda = 1.2 \text{ \AA}$ del ejemplo 3-1, resultarían evidentes.

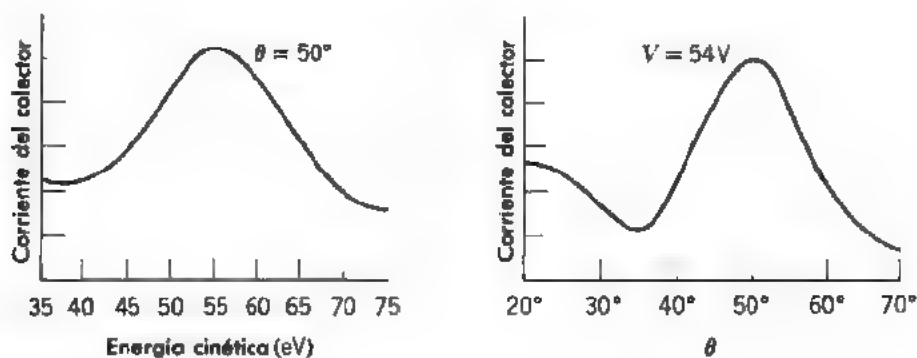
En 1926, Elsasser propuso que la naturaleza ondulatoria de la materia podía ser probada del mismo modo como inicialmente se probó la naturaleza ondulatoria de los rayos X, a saber, haciendo incidir un haz de electrones, con la energía apropiada, sobre un sólido cristalino. Los átomos del cristal son utilizados como un arreglo tridimensional de centros dispersores para la onda electrónica y, por lo tanto, deberán dispersar fuertemente a los electrones en ciertas direcciones características, de igual forma que en la difracción de rayos X. Esta idea fue confirmada experimentalmente por Davisson y Germer en Estados Unidos y por Thomson en Escocia.

El aparato de Davisson y Germer se muestra esquemáticamente en la figura 3-1. Los electrones producidos por un filamento caliente son acelerados a través de una diferencia de potencial V y emergen del "cañón electrónico" G con una energía cinética eV . Este haz de

**FIGURA 3-1**

Aparato de Davisson y Germer. Los electrones de un filamento F son acelerados por una diferencia de potencial variable V . Después de dispersarse en el cristal C , son colectados por el detector D .

electrones incide perpendicularmente sobre un monocristal de nickel en C . El detector D se coloca a un ángulo θ determinado y se realizan medidas de la intensidad del haz dispersado para varios valores del potencial de aceleración V . Por ejemplo, en la figura 3-2, se muestra que un haz fuertemente dispersado es detectado a $\theta = 50^\circ$ para $V = 54V$. La existencia de este "pico" en el patrón de electrones dispersados demuestra cualitativamente la validez del postulado de de Broglie, ya que, *sólo puede explicarse como una interferencia constructiva de ondas dispersadas por el arreglo periódico de los átomos hacia los planos del cristal*. El fenómeno es análogo a las bien conocidas "reflexiones de Bragg" que ocurren en la dispersión de rayos X por los planos atómicos de un cristal y no puede entenderse en base al movimiento de una partícula clásica sino sólo en base al movimiento de ondas. Las partículas clásicas no pueden mostrar interferencia, mientras que las ondas sí lo hacen. La interferencia que aquí se implica, no ocurre entre las ondas asociadas con un electrón y las ondas asociadas con otro, sino que se refiere a la interferencia que ocurre entre diferentes partes de la onda asociada con un electrón y que han sido dispersadas por varias regiones del cristal. Esto se puede demostrar, si se utiliza un haz de electrones con una intensidad tan baja que los electrones pasan por un aparato uno por uno y mostrando que el patrón de electrones dispersados permanece invariante.

**FIGURA 3-2**

Izquierda: la corriente del colector en el detector D de la figura 3-1, como función de la energía cinética de los electrones incidentes, mostrando un máximo de difracción. El ángulo θ en la figura 3-1, se ajusta a 50° . Si se utiliza un valor apreciablemente mayor o menor, el máximo de difracción desaparece. *Derecha:* la corriente como función del ángulo del detector para un valor fijo de la energía cinética electrónica, 54 eV.

El origen de una reflexión de Bragg, se muestra en la figura 3-3 y la *relación de Bragg*, a que está sujeta, se deriva en el pie de figura.

$$n\lambda = 2d \sin \varphi \quad (3-3)$$

Para las condiciones mostradas en la figura 3-3, la distancia interplanar efectiva d se puede medir por dispersión de rayos X del mismo cristal y resulta ser 0.91 \AA . Como $\theta = 50^\circ$ entonces $\varphi = 90^\circ - 50^\circ/2 = 65^\circ$. La longitud de onda calculada de (3-3), suponiendo $n = 1$, resulta

$$\lambda = 2d \sin \varphi = 2 \times 0.91 \text{ \AA} \times \sin 65^\circ = 1.65 \text{ \AA}$$

Para electrones de 54 eV, la longitud de onda de de Broglie calculada de (3-2), es

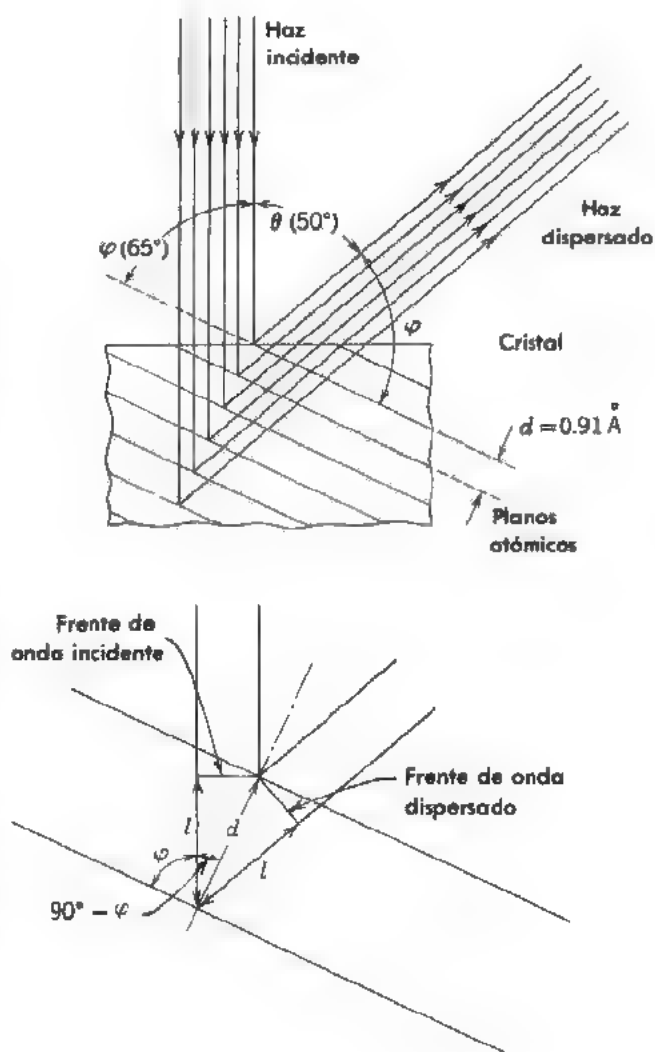
$$\lambda = h/p = 6.6 \times 10^{-34} \text{ joule-seg} / 4.0 \times 10^{-24} \text{ kg-m/seg} = 1.65 \text{ \AA}$$

Esta impresionante concordancia proporciona una confirmación cuantitativa de la relación de de Broglie entre λ , p y h .

La amplitud del pico observado en la figura 3-2, también se puede entender fácilmente, ya que, los electrones de baja energía no pueden penetrar profundamente en el cristal, de modo que sólo un número pequeño de planos atómicos contribuyen a la onda difractada. Por lo tanto, el máximo correspondiente a la difracción no es *estrecho*. Sin lugar a dudas, todos los resultados experimentales estuvieron en excelente concordancia tanto cualitativa como cuantitativa-

FIGURA 3-3

Arriba: el haz fuertemente difractado a $\theta = 50^\circ$ y $V = 54 \text{ V}$ resulta de la dispersión de tipo ondulatorio por la familia de planos atómicos que se muestran, los cuales tienen una distancia de separación $d = 0.91 \text{ \AA}$. El ángulo de Bragg es $\varphi = 65^\circ$. La refracción del haz dispersado al atravesar la superficie del cristal, no se indica por simplicidad. Abajo: derivación de la relación de Bragg, mostrando sólo dos planos atómicos y dos rayos correspondientes a los haces incidente y difractado. Si el número de longitudes de onda que caben en la distancia $2l$ entre los frentes de onda incidente y dispersado, es un entero dado por $n\lambda$, medida sobre el rayo inferior, entonces, las contribuciones de ambos rayos al frente de onda dispersado, estarán en fase y se obtendrá un máximo de difracción en el ángulo φ . Como $d = \cos(90^\circ - \varphi) = \sin \varphi$, se tiene $2l = 2d \sin \varphi$ y por lo tanto se obtiene la relación de Bragg $n\lambda = 2d \sin \varphi$. El máximo de difracción de "primer orden", ($n = 1$), por lo general el más intenso.



mente con la predicción de de Broglie, aportando evidencias convincentes de que las partículas materiales se mueven de acuerdo con las leyes del movimiento de ondas.

En 1927, G.P. Thomson demostró la difracción de haces electrónicos que pasan a través de películas delgadas, confirmando independientemente y en detalle, la relación de de Broglie $\lambda = h/p$. Así como el experimento de Davisson-Germer es análogo al de Laue en difracción de rayos X (reflexión del arreglo regular de planos atómicos en un monocristal grande), el experimento de Thomson es análogo al método de Debye-Hull-Scherrer de difracción de rayos X por un polvo (transmisión a través de un agregado de cristales pequeños orientados aleatoriamente). Thomson utilizó electrones de mayor energía, que son mucho más penetrantes, de modo que son varios cientos de planos atómicos los que contribuyen a la onda difractada. El patrón de difracción resultante tiene una estructura muy precisa. A manera de comparación, en la figura 3-4 se muestra un patrón de difracción de rayos X y un patrón de difracción de electrones de sustancia policristalina (sustancia en la que se tiene un gran número de cristales microscópicos orientados aleatoriamente).

Resulta interesante hacer notar que J.J. Thomson en 1897 descubrió el electrón (caracterizándolo como una partícula con una relación carga-masa bien definida) y quien recibió el premio Nobel en 1906; fue el

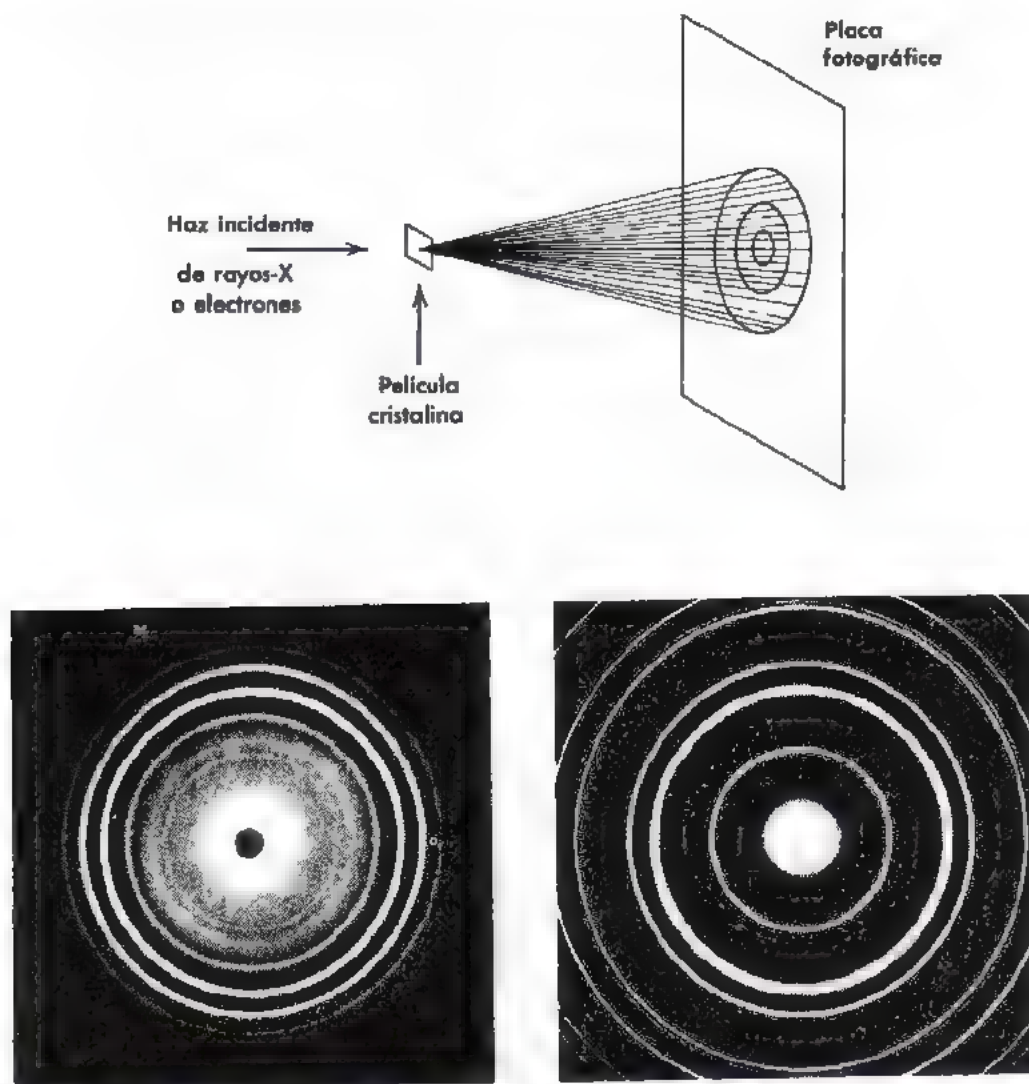


FIGURA 3-4

Arriba: arreglo experimental para la difracción de Debye-Scherrer de rayos X o electrones por un material policristalino. *Abajo a la izquierda:* patrón Debye Scherrer de difracción de rayos X por cristales de óxido de Zirconio. *Abajo a la derecha:* patrón Debye-Scherrer de difracción de electrones por cristales de oro.

**FIGURA 3-5**

Arriba: patrón de Laue de la difracción de rayos X por un monocristal de cloruro de sodio. *Abajo:* patrón de Laue de difracción de neutrones de un reactor nuclear por un monocristal de cloruro de sodio

padre de G.P. Thomson, quien en 1927 descubrió experimentalmente la difracción de electrones y recibió el premio Nobel (con Davisson) en 1937. Acerca de lo anterior escribió Max Jammer: "Uno se inclinaría por decir que a Thomson, el padre, le fue otorgado el premio Nobel por haber demostrado que el electrón es una partícula y a Thomson, el hijo, por haber demostrado que el electrón es una onda".

Todos los objetos materiales, cargados o descargados, no solo los electrones, muestran características ondulatorias en su movimiento, bajo las condiciones de la óptica física. Por ejemplo, Estermann, Stern y Frisch, realizaron experimentos cuantitativos acerca de la difracción de haces moleculares de hidrógeno y haces atómicos de helio, por un cristal de fluoruro de litio; asimismo, Fermi, Marshall y Zinn demostraron la difracción e interferencia de neutrones lentos. En la figura 3-5 se muestra un patrón de difracción de neutrones en un cristal de cloruro de sodio. Inclusive se ha construido un interferómetro que opera con haces de electrones. La existencia de ondas de materia está bien establecida.

Resulta instructivo hacer notar que para poder encontrar evidencias experimentales de la naturaleza ondulatoria de la materia, se tuvo que recurrir a longitudes de onda de de Broglie relativamente grandes. La materia y la radiación, ambas presentan, propiedades de partícula y onda, tanto para longitudes de onda grandes como pequeñas. Los aspectos corpusculares se acentúan, cuando se estudia su emisión o absorción, mientras que los aspectos ondulatorios se acentúan, cuando se estudia su comportamiento al moverse a través de un sistema. Sin embargo, los aspectos ondulatorios de su movimiento son más difíciles de observar a medida que su longitud de onda es más pequeña. Una vez más se puede apreciar el papel tan importante que juega la constante de Planck h . Si h fuera cero, en $\lambda = h/p$ se obtendría $\lambda = 0$ en todos los casos. Por lo tanto, todas las partículas materiales tendrían una longitud de onda menor que cualquier dimensión característica y nunca sería posible observar efectos de difracción. Aunque el valor de h definitivamente no es cero, es pequeño. Esta pequeñez de h es lo que oscurece la existencia de ondas materiales en el mundo macroscópico, ya que, se deberán tener impulsos muy pequeños para poder obtener longitudes de onda mensurables. Para partículas macroscópicas ordinarias, su masa es tan grande que el impulso es siempre lo suficientemente grande como para que la longitud de onda de de Broglie sea suficientemente pequeña y se encuentre fuera del alcance de la detección experimental, y así la mecánica clásica reina suprema. En el mundo microscópico, las partículas materiales tienen masas tan pequeñas que sus impulsos son pequeños aun cuando sus velocidades son bastante altas. Por lo tanto, sus longitudes de onda de de Broglie son lo suficientemente grandes como para ser comparables con las dimensiones características de los sistemas de interés, tales como átomos, y sus propiedades ondulatorias son experimentalmente observables en su movimiento. Sin embargo, no debe olvidarse que en sus interacciones, por ejemplo cuando son detectadas, sus propiedades corpusculares son dominantes aún cuando sus longitudes de onda sean grandes.

Ejemplo 3-2. En los experimentos con átomos de helio a los que anteriormente se hizo referencia, se produce un haz de átomos con velocidad casi uniforme de 1.635×10^5 cm/seg, permitiendo el escape de helio en forma de gas, a través de un pequeño agujero en el recipiente que lo contiene, pasando a una cámara evacuada y luego a través de rendijas muy angostas sobre discos giratorios paralelos de corta separación (un selector mecánico de velocidades). Los átomos inciden sobre la superficie de un cristal de fluoruro de litio y se observa un haz de átomos de helio fuertemente difractado que emerge del cristal. El haz difractado se detectó con un medidor de presión de alta sensibilidad. El análisis usual de los resultados experimentales de la difracción en el cristal indican una longitud de onda de 0.600×10^{-8} cm. ¿Cómo es la concordancia de esto con el valor calculado de la longitud de onda de de Broglie?

La masa de un átomo de helio es

$$m = \frac{M}{N_0} = \frac{4.00 \text{ g/mol}}{6.02 \times 10^{23} \text{ atom/mol}} = 6.65 \times 10^{-27} \text{ kg}$$

De acuerdo con la ecuación de de Broglie, la longitud de onda es:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{6.63 \times 10^{-34} \text{ joule-seg}}{6.65 \times 10^{-27} \text{ kg} \times 1.635 \times 10^8 \text{ m/seg}} = 0.609 \times 10^{-10} \text{ m} \\ = 0.609 \times 10^{-8} \text{ cm}$$

Este resultado es 1.5% mayor que el valor medido por difracción en un cristal, pero está dentro de los límites de error del experimento. ◀

Experimentos como el considerado en el ejemplo 3-2 son muy difíciles de realizar, ya que las intensidades que se obtienen en haces atómicos son muy pequeñas. Los experimentos de difracción de neutrones, utilizando cristales con distancia interatómica conocida, proporcionan una confirmación precisa de la ecuación de de Broglie y de la existencia de ondas de materia. La precisión se debe a que la fuente de neutrones en reactores nucleares es muy abundante y, efectivamente, la difracción de neutrones es hoy día un método importante para el estudio de estructuras cristalinas. Ciertos cristales, como los orgánicos hidrogenados, son particularmente adecuados para análisis con difracción de neutrones, ya que los neutrones son fuertemente dispersados por los átomos de hidrógeno, mientras que los rayos x son dispersados muy débilmente por dichos átomos. Principalmente, los rayos x interactúan con los electrones en el átomo y los electrones interactúan con la carga nuclear así como con los electrones atómicos por fuerzas electromagnéticas, de modo que su interacción con átomos de hidrógeno es débil, ya que su carga es pequeña. Los neutrones, sin embargo, interactúan con el núcleo de los átomos por medio de fuerzas nucleares y la interacción es fuerte.

3.2 La dualidad onda-partícula

En la física clásica, la energía es transportada por partículas o por ondas. El físico clásico observaba las ondas de agua transportando energía sobre la superficie del agua o balas transportando energía del cañón al blanco. De tales experiencias, construyeron un modelo ondulatorio de ciertos fenómenos macroscópicos y un modelo corpuscular para otros fenómenos macroscópicos, extrapolando naturalmente estos modelos a regiones menos accesibles al ojo humano. Así por ejemplo, se explicó la propagación del sonido en base al modelo ondulatorio y la presión de los gases en base al modelo corpuscular (teoría cinética). El éxito obtenido los condicionó a esperar que todo ente debiera ser o partícula u onda. De hecho, estos éxitos llegaron a los primeros años del siglo veinte, con las aplicaciones de la teoría ondulatoria de Maxwell a la radiación y el descubrimiento de partículas elementales de materia, tales como el neutrón y el positrón.

Así pues, el físico clásico no estaba preparado para descubrir que para poder entender la radiación, en algunas situaciones era necesario invocar un modelo corpuscular, como en el efecto Compton, mientras que en otras situaciones, un modelo ondulatorio, como en la difracción de rayos X. Pero quizás, sea más sorprendente el hecho de que esta dualidad onda-partícula se aplique, tanto a la materia, como a la radiación. La relación carga-masa del electrón y su rastro de ionización en la materia (secuencia de colisiones localizadas) sugieren un modelo corpuscular, sin embargo, la difracción de electrones sugiere un modelo ondulatorio. El físico actual sabe que, a un ente dado, debe aplicarle ambos modelos. Sin embargo, es importante hacer notar que, en una medición dada, se debe aplicar un solo modelo, ya que no se puede utilizar ambos modelos bajo las mismas circunstancias. Cuando una partícula es detectada, mediante algún tipo de interacción, actúa como partícula, en el sentido de que está localizada; cuando está en movimiento, actúa como onda, en el sentido de que se observan fenómenos de interferencia y, desde luego, una onda se extiende y no está localizada.

Neils Bohr resumió esta situación en su *principio de complementariedad*. Los modelos corpuscular y ondulatorio son complementarios; si una medida prueba el carácter ondulatorio de la radiación o la materia, entonces es imposible probar la naturaleza corpuscular en el mismo

experimento y viceversa. El modelo que se utilice lo determina la naturaleza del experimento. Además, el conocimiento de la radiación o la materia será incompleto, a menos que se consideren medidas que revelen tanto los aspectos ondulatorios como los corpusculares. Así pues, la radiación y la materia no son ni simplemente ondas ni simplemente partículas. Para describir este comportamiento, se requiere un modelo más general, y desde el punto de vista clásico, más complicado, a pesar de que en casos extremos sea aplicable un modelo ondulatorio simple o un modelo corpuscular simple.

La conexión entre los modelos corpuscular y ondulatorio, se encuentra en una interpretación probabilística de la dualidad onda-partícula. En el caso de la radiación, fue Einstein quien unificó las teorías ondulatoria y corpuscular, subsecuentemente Max Born aplicó un argumento similar para unificar las teorías ondulatoria y corpuscular de la materia.

Desde el punto de vista ondulatorio, la intensidad de radiación, I , es proporcional a $\overline{\mathcal{E}^2}$, donde $\overline{\mathcal{E}^2}$ es el promedio sobre un ciclo del cuadrado de la intensidad de campo eléctrico de la onda. (I es el valor promedio del llamado vector de Poynting y se utiliza el símbolo \mathcal{E} en lugar de E , para el campo eléctrico, para evitar se confunda con la energía total E). Desde el punto de vista de los fotones o corpuscular, la intensidad de la radiación se escribe como $I = Nh\nu$, donde N es el número promedio de fotones que cruzan una unidad de área, perpendicular a la dirección de propagación, por unidad de tiempo. Fue Einstein quien sugirió que $\overline{\mathcal{E}^2}$, que en la teoría electromagnética es proporcional a la energía radiante en una unidad de volumen, podría interpretarse como una medida del número promedio de fotones por unidad de volumen.

Recuérdese que Einstein introdujo la idea de granularidad en la radiación, abandonando la interpretación continua de Maxwell. Esto conduce a una interpretación estadística de la intensidad. Desde este punto de vista, una fuente puntual emite fotones al azar en todas direcciones. El número promedio de fotones que crucen una unidad de área, decrecerá a medida que aumente la distancia entre la fuente y el área. Esto se debe a que los fotones se dispersan sobre una esfera cuya área es mayor a medida que están más alejados de la fuente. Como el área de una esfera es proporcional al cuadrado de su radio, en promedio, se obtiene una ley inversamente proporcional al cuadrado para la intensidad, de igual modo que en el caso ondulatorio. Desde el punto de vista ondulatorio, puede imaginarse que, desde una fuente, se generan ondas esféricas cuya intensidad disminuye en forma inversamente proporcional a la distancia de la fuente. En este caso, estas ondas se pueden considerar como ondas guía para los fotones, cuya intensidad puede medirse por $\overline{\mathcal{E}^2}$, las ondas por sí mismas, no poseen energía —solo son fotones— pero son una construcción artificial cuya intensidad mide el número promedio de fotones por unidad de volumen.

Se ha utilizado la palabra "promedio", porque los procesos de emisión son de naturaleza estadística. No se especifica cuántos fotones cruzan una unidad de área por unidad de tiempo, solo su número promedio; su número exacto puede fluctuar en el espacio y en el tiempo, del mismo modo como en la teoría cinética de los gases existen fluctuaciones de muchas cantidades respecto a un valor promedio. Sin embargo, se puede afirmar categóricamente, que la probabilidad de que un fotón cruce una unidad de área a 3 m de la fuente, es exactamente un noveno de la probabilidad de que un fotón cruce una unidad de área a 1 m de la fuente. Por lo tanto, en la fórmula $I = Nh\nu$, N es un valor promedio que es una medida de la probabilidad de encontrar a un fotón cruzando una unidad de área en una unidad de tiempo. Si se igualan las expresiones ondulatoria y corpuscular, se tiene;

$$I = (1/\mu_0 c) \overline{\mathcal{E}^2} = h\nu N$$

de modo que $\overline{\mathcal{E}^2}$ es proporcional a N . Entonces, la interpretación de Einstein de $\overline{\mathcal{E}^2}$, como medida probabilística de la densidad de fotones, se va aclarando. Se espera que, como en la teoría cinética, las fluctuaciones respecto a un promedio sean más notorias a bajas intensidades que a altas intensidades, de modo que, en ese caso, los fenómenos granulares cuánticos contradicen más dramáticamente el punto de vista del espectro continuo clásico.

En analogía al punto de vista de Einstein de la radiación, Max Born propuso una unión similar de la dualidad onda-partícula de la materia. Esto sucedió varios años después de que Schrödinger desarrolló su generalización del postulado de de Broglie, llamada *mecánica cuántica*. La teoría de Schrödinger será examinada cuantitativamente en capítulos posteriores. Aquí sólo se tratará de usar la idea de Born, en forma cualitativa para conceptualmente preparar el escenario para un análisis detallado subsecuente.

Se asociará a las ondas de materia algo más que una longitud de onda y una frecuencia. Esto se hará introduciendo una función que represente a la onda de de Broglie, llamada *función de onda*. Por ejemplo, para partículas moviéndose en la dirección x con un valor preciso de su impulso lineal y su energía, la función de onda se puede escribir simplemente como una función senoidal de amplitud A , tal como:

$$\Psi(x,t) = A \sin 2\pi \left(\frac{x}{\lambda} - \nu t \right) \quad (3-4a)$$

Esto es análogo a

$$\mathcal{E}(x,t) = A \sin 2\pi \left(\frac{x}{\lambda} - \nu t \right) \quad (3-4b)$$

para el campo eléctrico de una onda electromagnética senoidal con longitud de onda λ , y frecuencia ν , moviéndose en la dirección x . La cantidad $\overline{\Psi^2}$ para ondas de materia, se comportará de manera análoga al de $\overline{\mathcal{E}^2}$ para ondas de radiación. Esa cantidad, el promedio del cuadrado de la función de onda de ondas de materia, es una medida de la probabilidad de encontrar a una partícula por unidad de volumen, en determinado lugar a un tiempo dado. Así como \mathcal{E} es una función del tiempo y del espacio, también lo es Ψ , y como se verá después, así como \mathcal{E} satisface una ecuación de onda, así también Ψ (la ecuación de Schrödinger). La cantidad \mathcal{E} es una onda (de radiación) asociada con un fotón, mientras que Ψ es una onda (de materia) asociada con una partícula.

Como dice Born: "De acuerdo con este punto de vista, el curso completo de eventos está gobernado por las leyes de la probabilidad, a un estado en el espacio, le corresponde una probabilidad definitiva, la cual es dada por la onda de de Broglie asociada con el estado. Por lo tanto, un proceso mecánico es acompañado por un proceso ondulatorio, la onda-guía, descrita por la ecuación de Schrödinger, cuya importancia está en dar la probabilidad de un curso definitivo del proceso mecánico. Si por ejemplo, la amplitud de la onda-guía es cero en cierto punto del espacio, esto quiere decir que la probabilidad de encontrar al electrón en ese punto es despreciablemente pequeña".

Así como desde el punto de vista de Einstein de la radiación, no se especifica la posición exacta de un fotón, sino que en su lugar se especifica $\overline{\mathcal{E}^2}$, la probabilidad de encontrar un fotón en cierta posición a un tiempo dado; así también, desde el punto de vista de Born, no se especifica la posición exacta de una partícula a un tiempo determinado, sino que se especifica $\overline{\Psi^2}$, la probabilidad de encontrar a la partícula en cierta posición a un tiempo dado. Además, así como se acostumbra a sumar funciones de onda ($\mathcal{E}_1 + \mathcal{E}_2 = \mathcal{E}$) para dos ondas electromagnéticas superpuestas, cuya intensidad resultante se obtiene de $\overline{\mathcal{E}^2}$, así también se podían sumar las funciones de onda de dos ondas de materia superpuestas ($\Psi_1 + \Psi_2 = \Psi$) cuya intensidad resultante será dada por $\overline{\Psi^2}$. Es decir, un *principio de superposición* es aplicable tanto a ondas de materia como a radiación. Esto concuerda con el sorprendente hecho experimental, de que la materia presenta propiedades de interferencia y difracción, hecho que simplemente no puede explicarse en base a las ideas de la mecánica clásica. Dos ondas siempre se pueden combinar de modo tal que resulte una onda de intensidad grande o que se cancelen, ya que pueden superponerse constructivamente (en fase) o destructivamente (fuera de fase), pero dos partículas clásicas no se pueden combinar de modo tal que se cancelen.

Posiblemente, el estudiante aceptará lo lógico de la fusión de los conceptos de onda y de partícula y, sin embargo, se preguntará si una interpretación probabilística o estadística es necesaria. En 1927, Heisenberg y Bohr fueron los primeros en demostrar que en la unión de las descripciones ondulatoria y corpuscular de la materia y la radiación, es esencial el concepto de probabilidad. Estos temas serán investigados en las siguientes secciones.

3.3 El principio de incertidumbre

El uso de consideraciones probabilísticas, no es ajeno a la física clásica. Por ejemplo, la mecánica estadística clásica utiliza la teoría de la probabilidad. Sin embargo, las leyes básicas de la física clásica (tales como las leyes de Newton) son deterministas, y el análisis estadístico es simplemente un instrumento que se utiliza en el tratamiento de sistemas muy complicados. Por otro lado, de acuerdo con Heisenberg y Bohr, el punto de vista probabilístico es fundamental en la física cuántica y el determinismo debe ser descartado. A continuación se verá cómo se llega a esta conclusión.

En mecánica clásica, pueden resolverse las ecuaciones de movimiento de un sistema con fuerzas dadas, para obtener la posición y el impulso de una partícula para todo valor del tiempo. Todo lo que se necesita conocer es la posición e impulso de la partícula para algún valor del tiempo, $t = 0$ (las condiciones iniciales), y el movimiento futuro será determinado exactamente. Esta mecánica ha sido utilizada con gran éxito en el mundo macroscópico, en astronomía por ejemplo, para predecir los movimientos subsecuentes de objetos en base a sus movimientos iniciales. Sin embargo, nótese, que en el proceso de hacer observaciones, el observador interactúa con el sistema. Un ejemplo de la astronomía moderna, es la medición precisa de la posición de la luna, haciendo rebotar ondas de radar en ella. El movimiento de la luna es perturbado por la medición, pero su masa es tan grande que la perturbación se puede ignorar. En una escala más pequeña, como un experimento macroscópico bien diseñado sobre la tierra, dichas perturbaciones son también generalmente muy pequeñas o al menos, controlables y se pueden tomar en cuenta de antemano por cálculos adecuados. Por lo tanto, el físico clásico suponía, de modo natural, que en el campo de los sistemas microscópicos, la posición y el impulso de un objeto, como un electrón, podrían determinarse exactamente por medio de observaciones similares. Heisenberg y Bohr pusieron en tela de juicio esta suposición.

La situación es muy similar a la que existía al nacimiento de la teoría de la relatividad. Los físicos hablaban de intervalos de tiempo y longitud, es decir, espacio y tiempo, sin preguntarse críticamente cómo son medidos en realidad. Por ejemplo, se hablaba de la simultaneidad de dos eventos separados, sin siquiera preguntarse cómo se podría establecer dicha simultaneidad. Einstein demostró que la simultaneidad no era un concepto absoluto, como se había supuesto antes, sino que dos eventos que son simultáneos para un observador, ocurren a tiempos diferentes para otro observador que se mueve respecto al primero. La simultaneidad es un concepto relativo. Así pues, de modo similar, debe preguntarse cómo se mide realmente la posición y el impulso.

En un experimento real, ¿se puede determinar la posición y el impulso de la materia o la radiación, en el mismo instante? La respuesta que se obtiene de la teoría cuántica, es, no más exactamente que lo permitido por el *principio de incertidumbre* de Heisenberg. Existen dos partes de este principio, también llamado principio de indeterminación. La primera parte implica la medición simultánea de la posición y el impulso. Afirma que en un experimento no se puede determinar simultáneamente el valor exacto de una componente del impulso, es decir, p_x de una partícula y también el valor exacto de la coordenada correspondiente x . Por otro lado, la precisión en la medición estará inherentemente limitada por el proceso de medida en sí, de modo tal que

$$\Delta p_x \Delta x \geq \hbar/2 \quad (3-5)$$

donde el impulso p_x se conoce hasta una incertidumbre de Δp_x y al mismo tiempo, la posición x hasta una incertidumbre de Δx . Aquí, \hbar (Léase h -barra) es una notación simplificada en lugar de $h/2\pi$, donde h es la constante de Planck. Es decir;

$$\hbar \equiv h/2\pi$$

Existen las relaciones correspondientes para las otras componentes del impulso, a saber, $\Delta p_x \Delta y \geq \hbar/2$ y $\Delta p_x \Delta z \geq \hbar/2$, y asimismo para el impulso angular. Es importante hacer notar que este principio nada tiene que ver con los adelantos en la instrumentación que conduzcan a mejores determinaciones simultáneas de p_x y x . Lo que el principio afirma es que aún con instrumentos ideales, nunca se puede superar $\Delta p_x \Delta x \geq \hbar/2$. Obsérvese también que se implica un *producto* de incertidumbres, de modo que, por ejemplo, entre más se modifique un experimento para mejorar p_x , más se sacrifica la habilidad de poder determinar x con precisión. Si p_x se conociera exactamente, se ignoraría totalmente la x (es decir, si $\Delta p_x = 0$, $\Delta x = \infty$). Por lo tanto, la *restricción no está en la precisión con la que se pueda medir x o p_x , sino en el producto $\Delta p_x \Delta x$ en una medida simultánea de ambas.*

La segunda parte del principio de incertidumbre está relacionada con medidas de la energía E , y el tiempo t necesarios para medir, por ejemplo, el intervalo Δt durante el cual un fotón es emitido de un átomo con una variación en su energía ΔE . En este caso

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar/2 \quad (3-6)$$

donde ΔE es la incertidumbre en el conocimiento de la energía E del sistema y Δt el intervalo característico de la rapidez de cambio del sistema.

Más adelante se demostrará que las relaciones de Heisenberg se pueden derivar del postulado de de Broglie y de propiedades sencillas comunes a toda onda. Dado que el postulado de de Broglie se puede verificar por los experimentos descritos anteriormente, se puede afirmar que el principio de incertidumbre se basa en el experimento. Asimismo, pronto se verá que este principio es consistente con otros experimentos. Sin embargo, primero se debe hacer notar que, una vez más, la constante de Planck sirve para distinguir los resultados cuánticos de los clásicos. Si h , o \hbar , fuera cero en (3-5) y (3-6), no habría ninguna limitación básica en las medidas, como es el caso en el punto de vista clásico. Una vez más, la pequeñez de h , es lo que pone al principio fuera de las experiencias ordinarias. Lo anterior es análogo a la pequeñez de la relación v/c en situaciones macroscópicas, que pone a la relatividad fuera de alcance en experiencias ordinarias. Por lo tanto, en principio, la física clásica tiene una validez limitada y, en el dominio microscópico, conducirá a contradicciones con los resultados experimentales, ya que si x y p no pueden determinarse simultáneamente, entonces las condiciones iniciales del movimiento no se pueden especificar exactamente y consecuentemente no se podrá determinar con precisión el comportamiento futuro de un sistema. En lugar de hacer predicciones deterministas sólo se pueden enunciar los resultados más probables de una observación, dando las probabilidades relativas de que ocurran. En efecto, como el hecho de observar un sistema lo perturba de modo no completamente predecible, la observación cambia el movimiento anterior del sistema a un estado de movimiento nuevo que no puede ser conocido completamente.

En lo siguiente se mostrará el origen físico del principio de incertidumbre, y en este proceso se obtendrá una visión más clara que ayudará a apreciar mejor una demostración más formal que se da en la sección subsecuente. Primeramente, se utiliza un experimento de pizarrón debido a Bohr, para verificar (3-5). Se propone medir, tan exactamente como sea posible, la posición de una partícula "puntua.", como un electrón. Para mayor precisión, se utiliza un microscopio para observar al electrón, como el que se ilustra en la figura 3-6. Para poder ver al electrón, es necesario iluminarlo, ya que lo que ve el observador, son los fotones de la luz dispersados por el electrón. En este punto, aún sin hacer cálculo alguno, se puede ver cómo

aparece el principio de incertidumbre. El propio acto de observar al electrón lo perturba. En el momento de iluminar al electrón, éste retrocede a consecuencia del efecto Compton, de modo tal que, como se verá, no se puede determinar completamente. Sin embargo, si el electrón no está iluminado, no puede ser observado (detectado). Por lo tanto, el principio de incertidumbre se refiere al proceso mismo de medición y expresa el hecho de que siempre existe una interacción indeterminada entre el observador y lo observado; no existe nada que pueda hacerse para evitar esta interacción o para compensarla por adelantado. En el caso que se está considerando, se puede tratar de reducir la perturbación al electrón lo más posible, utilizando una fuente de luz débil. La fuente más débil que se puede obtener será tal que se observará al electrón sólo si *un solo fotón* dispersado entra en la lente objetivo. La magnitud del impulso del

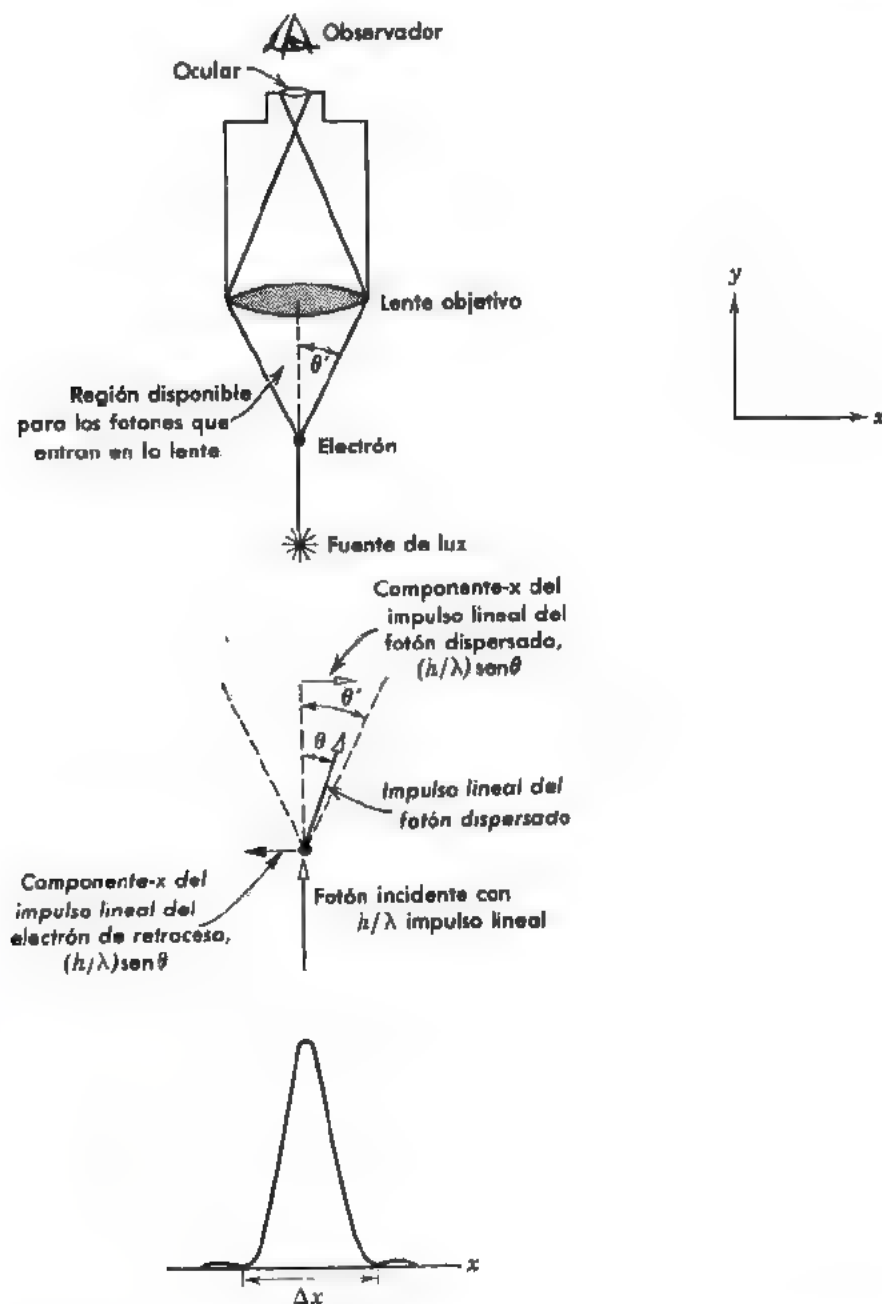


FIGURA 3-6

Microscopio del experimento de pizarrón de Bohr. *Arriba:* el aparato. *Centro:* dispersión de un fotón de iluminación por un electrón. *Abajo:* imagen del patrón de difracción del electrón, visto por el observador.

fotón es $p = h/\lambda$. Pero el fotón puede ser dispersado en *cualquier dirección* dentro del ángulo $2\theta'$ que subtiende la lente objetivo en el electrón. Por esta razón, no es posible considerar la interacción. Por lo tanto, se encuentra que la componente x del impulso del fotón puede variar desde $+p \sin \theta'$ hasta $-p \sin \theta'$ y su incertidumbre después de la interacción está dada por:

$$\Delta p_x = 2p \sin \theta' = (2h/\lambda) \sin \theta'$$

Por la conservación del impulso, se requiere que el electrón reciba impulso de retroceso en la dirección x que será igual en magnitud al cambio en la magnitud de la componente x del impulso del fotón y, por lo tanto, la componente x del impulso del electrón, tendrá una incertidumbre dada por la misma cantidad. Obsérvese que para reducir Δp_x , se puede utilizar luz de mayor longitud de onda o utilizar un microscopio cuya lente objetivo subtienda un ángulo menor.

¿Qué hay de la posición del electrón a lo largo de x ? Recuérdese que la imagen de un punto, en un microscopio, no es un punto, sino un patrón de difracción; la imagen del electrón es "borrosa". El poder de resolución del microscopio determina la exactitud última a la cual se puede localizar el electrón. Si como medida de la incertidumbre en x se toma la amplitud del máximo de difracción central, una expresión bien conocida para el poder de resolución de un microscopio da:

$$\Delta x = \lambda / \sin \theta'$$

(nótese que como $\sin \theta \sim \theta$, este es un ejemplo de la relación general, $a \sim \lambda/\theta$ entre la dimensión característica de un aparato de difracción, la longitud de onda de las ondas difractadas y el ángulo de difracción). Entonces, el único fotón disponible debió originarse en *algún* lugar dentro de esta región del eje del microscopio, de manera tal que la incertidumbre en la posición es Δx . (No se puede asegurar exactamente en dónde se origina un fotón dado, a pesar de que un número grande de repeticiones del experimento, los fotones que forman la imagen total, producirán el patrón de difracción que se muestra en la figura). Obsérvese que para reducir Δx se puede analizar luz de longitud de onda más corta o una lente objetivo que subtienda un ángulo mayor.

Tomando el producto de las incertidumbres, se encuentra

$$\Delta p_x \Delta x = \left(\frac{2h}{\lambda} \sin \theta' \right) \left(\frac{\lambda}{\sin \theta'} \right) = 2h \quad (3-7)$$

en concordancia razonable con el límite último $\hbar/2$ que fija el principio de incertidumbre. No es posible hacer Δp_x y Δx *simultáneamente*, tan pequeñas como se quiera, ya que el procedimiento que reduce una de ellas incrementa la otra. Por ejemplo, si se utiliza luz de longitud de onda corta (por ejemplo rayos γ) para reducir Δx obteniendo una mejor resolución, se aumenta el retroceso de Compton y aumenta Δp_x , e inversamente. De hecho, la longitud de onda, λ y el ángulo θ' subtendido por la lente objetivo, ni siquiera aparecen en el resultado. En la práctica, los resultados experimentales serán peores que lo que se sugiere en (3-7), ya que dicho resultado representa el caso más ideal posible. Sin embargo, se llega a ese resultado a partir de fenómenos físicos genuinamente mensurables, a saber, el efecto Compton y el poder de resolución de una lente.

En realidad, el estudiante no debe pensar que hay algo de misterioso en este resultado. Es un resultado directo de la cuantización de la radiación. Fue necesario tener al menos un fotón iluminando al electrón, o de otra forma no habría iluminación; y aún un solo fotón lleva un impulso de magnitud $p = h/\lambda$. Es este único fotón el que provee la interacción entre el microscopio y el electrón. Esta interacción perturba la partícula de modo tal, que no se puede predecir ni controlar y el resultado es que ni las coordenadas ni el impulso pueden conocerse completamente después de una medición. Si las leyes de la física clásica fuesen válidas, entonces

la radiación sería considerada como continua en lugar de granular y la iluminación se podría reducir a niveles arbitrariamente pequeños al mismo tiempo que se utilizarían longitudes de onda arbitrarias para obtener una resolución "perfecta". En principio no habría un límite inferior simultáneamente para la resolución y el impulso de retroceso y no habría principio de incertidumbre. Pero esto no se puede hacer, un fotón es indivisible. Una vez más se puede ver de $\Delta p_x \Delta x \geq \hbar/2$, que la constante de Planck es una medida de la mínima perturbación incontrollable que distingue a la física cuántica de la física clásica.

Ahora se considerará (3-6) que relaciona la incertidumbre en la energía y en el tiempo. Para el caso de una partícula libre, (3-6) puede obtenerse de (3-5), que relaciona la posición y el impulso en la forma siguiente. Considérese un electrón que se mueve a lo largo del eje x y cuya energía se puede escribir como $E = p_x^2/2m$. Si la incertidumbre en p_x está dada por Δp_x , entonces la incertidumbre en E estará dada por $\Delta E = (p_x/m)\Delta p_x = v_x \Delta p_x$. En este caso v_x puede interpretarse como la velocidad de retroceso a lo largo de x , del electrón que es iluminado para medir su posición o si el tiempo requerido para una medida es Δt , entonces, la incertidumbre en su posición x es $\Delta x = v_x \Delta t$. Combinando $\Delta t = \Delta x/v_x$ y $\Delta E = v_x \Delta p_x$, se obtiene $\Delta E \Delta t = \Delta p_x \Delta x$. Pero $\Delta p_x \Delta x \geq \hbar/2$. Por lo tanto:

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar/2$$

Ejemplo 3-3. La velocidad de una bala ($m = 50\text{g}$) y la velocidad de un electrón. ($m = 9.1 \times 10^{-28}\text{ kg}$) se miden y resultan iguales, a 300 m/seg, con una incertidumbre de 0.01%. ¿Cuál será la exactitud fundamental con que se podrá determinar la posición de cada una, si la posición y la velocidad se miden simultáneamente en el mismo experimento?

Para el electrón

$$p = mv = 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg} \times 300 \text{ m/seg} = 2.7 \times 10^{-28} \text{ kg-m/seg}$$

$$\Delta p = m\Delta v = 0.0001 \times 2.7 \times 10^{-28} \text{ kg-m/seg} = 2.7 \times 10^{-32} \text{ kg-m/seg}$$

de modo que;

$$\Delta x \geq \frac{\hbar}{4\pi\Delta p} = \frac{6.6 \times 10^{-34} \text{ joule-sec}}{4\pi \times 2.7 \times 10^{-32} \text{ kg-m/seg}} = 2 \times 10^{-3} \text{ m} = 0.2 \text{ cm}$$

Para la bala

$$p = mv = 0.05 \text{ kg} \times 300 \text{ m/seg} = 15 \text{ kg-m/seg}$$

$$\Delta p = 0.0001 \times 15 \text{ kg-m/seg} = 1.5 \times 10^{-3} \text{ kg-m/seg}$$

de modo que;

$$\Delta x \geq \frac{\hbar}{4\pi\Delta p} = \frac{6.6 \times 10^{-34} \text{ joule-sec}}{4\pi \times 1.5 \times 10^{-3} \text{ kg-m/seg}} = 3 \times 10^{-32} \text{ m.}$$

Por lo tanto, para objetos macroscópicos, tales como balas, el principio de incertidumbre no impone límites prácticos en el procedimiento de medición, ya que Δx en este caso resulta aproximadamente 10^7 veces el diámetro de un núcleo; pero para objetos microscópicos, como electrones, existen límites prácticos, ya que en este ejemplo Δx resulta 10^7 veces el diámetro de un átomo. ◀

3.4 Propiedades de ondas de materia

En esta sección se derivará el principio de incertidumbre combinando las relaciones de de Broglie-Einstein, $p = h/\lambda$ y $E = h\nu$, con propiedades matemáticas simples que son univer-

sales a todas las ondas. Se empezará el desarrollo de estas propiedades llamando la atención a una paradoja aparente.

La velocidad de propagación w para una onda con longitud de onda λ y frecuencia ν , está dada por la relación familiar, que más adelante se verificará

$$w = \lambda \nu \quad (3-8)$$

Evaluable w para una onda de de Broglie asociada con una partícula de impulso p y energía total E se obtiene;

$$w = \lambda \nu = \frac{h}{p} \frac{E}{h} = \frac{E}{p}$$

En seguida se supone que la partícula se mueve a una velocidad v no relativista en una región de energía potencial cero. (La validez de las conclusiones no será limitada por estas suposiciones). Evaluando p y E en términos de v y de la masa m de la partícula se encuentra

$$w = \frac{E}{p} = \frac{mv^2/2}{mv} = \frac{v}{2} \quad (3-9)$$

Este resultado es, en apariencia preocupante, pues parecía que la onda de materia no viaja a la misma velocidad que la partícula que representa, pero en realidad no existe dificultad alguna como se demostrará en la discusión que sigue.

Imagínese a la partícula moviéndose a lo largo del eje x , sin la acción de fuerzas ya que su energía potencial tiene el valor constante cero. También moviéndose a lo largo del eje x se tiene a su onda de materia asociada. Supóngase también, en este experimento de pizarrón, que a lo largo del eje x se han distribuido un conjunto (hipotético) de instrumentos capaces de medir la amplitud de la onda de materia. Para cierto tiempo $t = 0$, se registran las lecturas en estos instrumentos. Los resultados del experimento pueden presentarse en una gráfica de los valores instantáneos de la onda, que se designan por $\Psi(x, t)$, como función de la distancia x , al tiempo fijo $t = 0$. En este momento no se necesita saber mucho acerca de ondas de materia para darse cuenta que *cualitativamente* la gráfica debe asemejarse a la que se muestra en la figura 3-7. La amplitud de la onda de materia, deberá estar modulada de modo tal, que su valor será diferente de cero sólo en una región finita del espacio en la vecindad de la partícula. Esto es necesario porque la onda de materia, de algún modo, debe estar espacialmente asociada con la partícula cuyo movimiento controla. La onda de materia tendrá la forma de un grupo de ondas y a medida que transcurra el tiempo, el grupo seguramente deberá moverse a lo largo del eje x con la misma velocidad que la partícula.

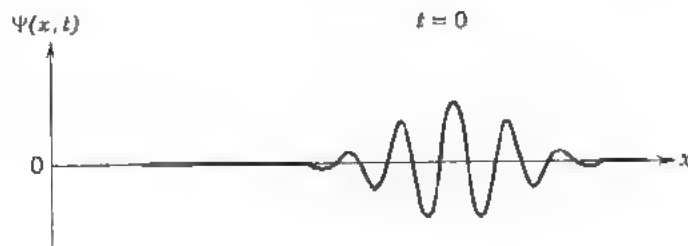


FIGURA 3-7

Una onda de de Broglie para una partícula.

El estudiante podrá recordar, de su estudio del movimiento de ondas clásicas, que para el movimiento de un grupo de ondas es necesario distinguir entre la velocidad g del grupo y la velocidad w , muy diferente, de las oscilaciones de las ondas individuales. Desde luego esto resulta alentador, pero debe demostrarse que g es igual a la velocidad de la partícula. Para esto, se desarrollará una relación entre g y las cantidades ν y λ , comparable con la relación (3-8) entre w y estas cantidades.

Se empezará considerando el caso más simple de movimiento ondulatorio, una onda senoidal de frecuencia ν y longitud de onda λ , que tiene amplitud constante y unitaria desde $-\infty$ hasta $+\infty$, pero que se mueve con velocidad uniforme en la dirección en que x aumenta. Una onda tal, puede representarse matemáticamente por la función:

$$\Psi(x,t) = \sin 2\pi \left(\frac{x}{\lambda} - \nu t \right) \quad (3-10a)$$

o en una forma más conveniente

$$\Psi(x,t) = \sin 2\pi(\kappa x - \nu t) \quad \text{donde } \kappa \equiv 1/\lambda \quad (3-10b)$$

Que lo anterior representa la onda descrita, puede verse de las consideraciones siguientes:

1. Fijando la x , en cualquier valor, se observa que la función oscila senoidalmente con frecuencia ν y amplitud uno.
2. Fijando t , se observa que la función tiene una dependencia senoidal con x , con longitud de onda λ o *longitud de onda recíproca* κ .
3. Los ceros de la función, que corresponden a los nodos de la onda que representa, se encuentran en las posiciones x_n para las cuales

$$2\pi(\kappa x_n - \nu t) = \pi n \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

$$x_n = \frac{n}{2\kappa} + \frac{\nu}{\kappa} t$$

Por lo tanto, estos nodos y de hecho todos los puntos sobre la onda se mueven en la dirección en que x crece, con velocidad

$$w = dx_n/dt$$

que es igual a

$$w = \nu/\kappa$$

Nótese que lo anterior es idéntico a (3-8), ya que $\kappa = 1/\lambda$.

En seguida se analizará el caso en que se modula la amplitud de las ondas para formar un grupo. Matemáticamente se puede obtener un grupo de ondas moviéndose en la dirección en que x crece, similar al grupo de ondas de materia que se ilustra en la figura 3-7, sumando un número infinitamente grande de ondas de la forma (3-10b), cada una con frecuencia ν y longitud de onda recíproca κ infinitamente diferentes. (Pronto se explicará cómo sucede lo anterior). Sin embargo, las técnicas matemáticas se complican y para el propósito presente, será suficiente considerar qué sucede si se suman sólo dos de esas ondas. Por lo tanto, se toma

$$\Psi(x,t) = \Psi_1(x,t) + \Psi_2(x,t) \quad (3-11)$$

donde

$$\Psi_1(x,t) = \sin 2\pi[\kappa x - \nu t]$$

y

$$\Psi_2(x,t) = \sin 2\pi[(\kappa + d\kappa)x - (\nu + d\nu)t]$$

Ahora bien,

$$\sin A + \sin B = 2 \cos [(A - B)/2] \sin [(A + B)/2]$$

Aplicando lo anterior al caso que nos ocupa, se tiene

$$\Psi(x,t) = 2 \cos 2\pi \left[\frac{d\kappa}{2} x - \frac{d\nu}{2} t \right] \sin 2\pi \left[\frac{(2\kappa + d\kappa)}{2} x - \frac{(2\nu + d\nu)}{2} t \right]$$

como $d\nu \ll 2\nu$ y $d\kappa \ll 2\kappa$, esto es:

$$\Psi(x,t) = 2 \cos 2\pi \left(\frac{d\kappa}{2} x - \frac{d\nu}{2} t \right) \sin 2\pi(\kappa x - \nu t) \quad (3-12)$$

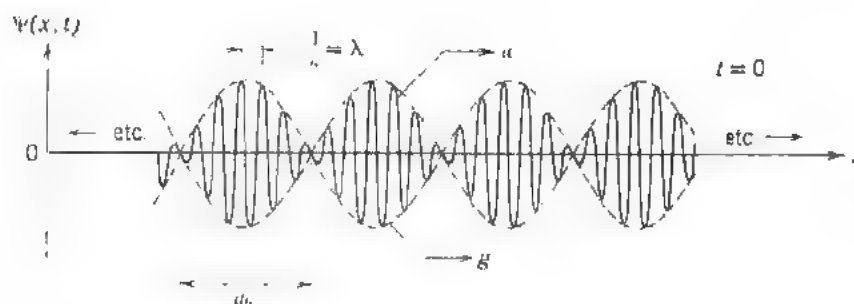
En la figura 3-8 se muestra una gráfica de $\Psi(x, t)$ como función de x para el valor fijo $t = 0$. El segundo término de $\Psi(x, t)$ es una onda de la misma forma que (3-10b), pero modulada por el primer término, de modo que las oscilaciones de $\Psi(x, t)$ caen dentro de la envolvente cuya amplitud varía periódicamente. Dos ondas cuyas longitudes de onda recíproca y frecuencia difieren ligeramente, se interfieren y se refuerzan alternativamente de modo tal que se producen grupos sucesivos. Estos grupos y las ondas individuales que contienen, se mueven en la dirección en que x crece. La velocidad w de las ondas individuales se pueden evaluar considerando el segundo término de $\Psi(x, t)$ y la velocidad g de los grupos se puede evaluar del primer término. Una vez más, procediendo como en la consideración 3, se obtiene

$$w = \frac{\nu}{\kappa} \quad (3-13a)$$

y también el resultado nuevo

$$g = \frac{d\nu/2}{d\kappa/2} = \frac{d\nu}{d\kappa} \quad (3-13b)$$

Para un número infinito de ondas que se combinen para formar un grupo en movimiento, se puede demostrar que la dependencia de la *velocidad de onda* w y la *velocidad de grupo* g con ν , κ y

**FIGURA 3-8**

Suma de dos ondas senoidales de frecuencias y longitudes de onda recíproca, ligeramente diferentes

$dv/d\kappa$ es exactamente la misma que para el caso sencillo que se ha considerado. Las ecuaciones (3-13a) y (3-13b) tienen validez general.

Finalmente, se tienen las condiciones para poder calcular la velocidad de grupo g del grupo de ondas asociado con la partícula en movimiento. De las relaciones de Einstein y de de Broglie se tiene

$$v = E/h \quad \text{y} \quad \kappa \equiv 1/\lambda = p/h$$

de modo que

$$dv = dE/h \quad \text{y} \quad d\kappa = dp/h$$

Por lo tanto, la velocidad de grupo es:

$$g = dv/d\kappa = dE/dp$$

Igualando

$$E = \frac{mv^2}{2} \quad \text{y} \quad p = mv$$

se obtiene

$$\frac{dE}{dp} = \frac{mv \, dv}{m \, dv} = v$$

de donde se obtiene el resultado satisfactorio de

$$g = v$$

La velocidad del grupo de ondas de materia es justamente igual a la velocidad de la partícula que gobiernan, y el postulado de de Broglie es internamente consistente. Utilizando expresiones relativistas para E y p , para evaluar dE/dp , se obtiene la misma conclusión.

A continuación se derivarán las relaciones de incertidumbre, combinando las relaciones de de Broglie-Einstein, $p = h/\lambda$ y $E = h\nu$, con las propiedades de grupos de ondas. Primero se considerará un caso límite simple. Sea λ la longitud de onda de de Broglie asociada con una partícula. Se puede representar una longitud de onda determinada (monocromática) en términos de una onda senoidal simple que se extiende a todos los valores de x , es decir, una onda sin modulación infinitamente larga como

$$\Psi = A \sin 2\pi(\kappa x - \nu t)$$

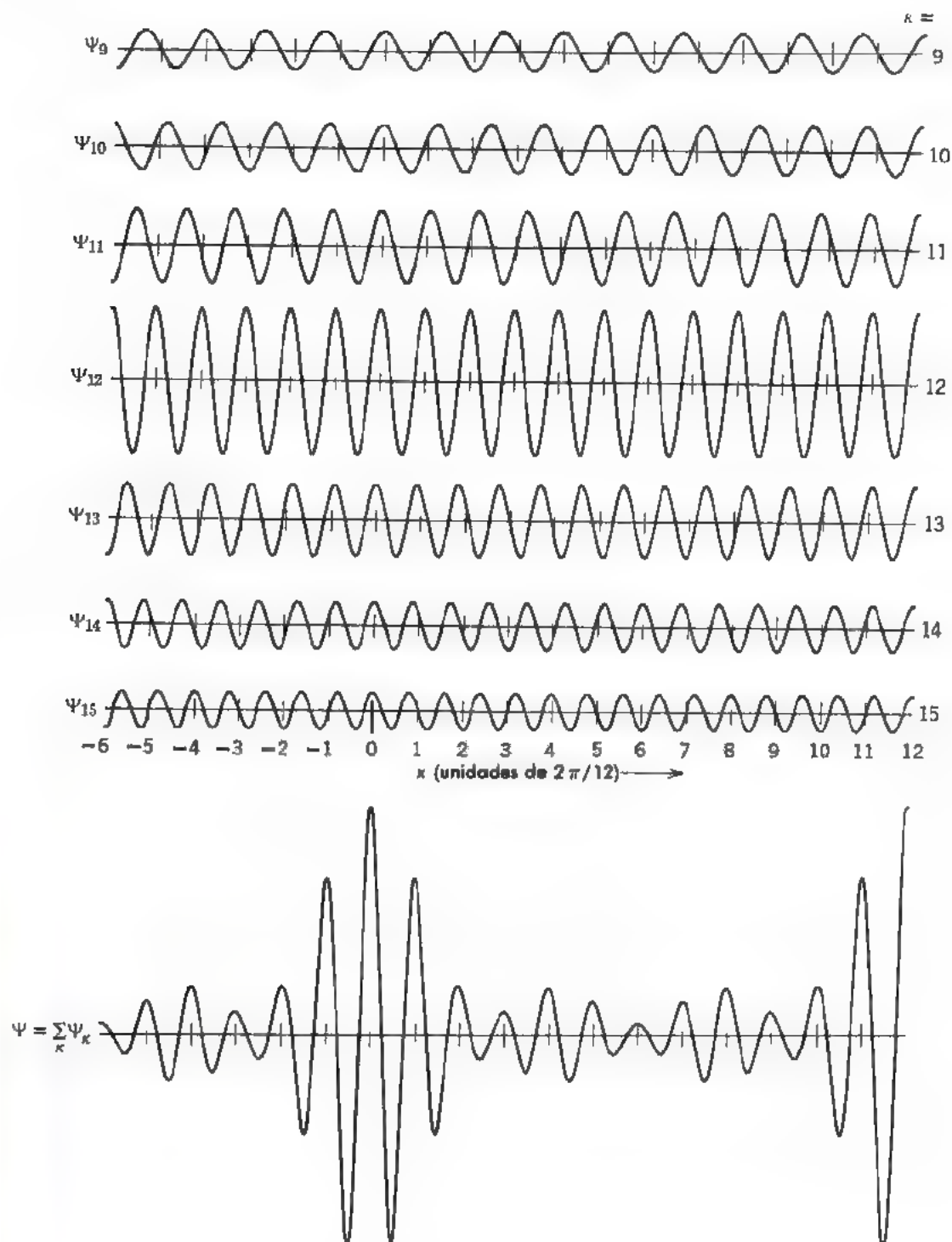
$$\Psi = A \cos 2\pi(\kappa x - \nu t)$$

Si la longitud de onda tiene definitivamente el valor λ , no existe la incertidumbre $\Delta\lambda$ y el impulso asociado a la partícula $p = h/\lambda$ será también definitivo, de modo que $\Delta p_x = 0$. En una onda tal, la amplitud tiene un valor constante A en todas partes; es la misma para toda la gama infinita de x . Por lo tanto, la probabilidad de encontrar a la partícula, que según Born está relacionada con la amplitud de la onda, no está concentrada en un intervalo particular de valores de x . En otras palabras, la posición de la partícula se desconoce totalmente. La partícula puede estar en cualquier parte, de modo que $\Delta x = \infty$. Análogamente se puede afirmar que como $E = h\nu$ y como la frecuencia tiene un valor definido, entonces $\Delta E = 0$. Pero, para asegurar que la amplitud de la onda es perfectamente constante en el tiempo, ésta debe ser observada durante un tiempo infinito, de modo que $\Delta t = \infty$. Para este caso sencillo, se establece que $\Delta p_x \Delta x \geq h/2$, y $\Delta E \Delta t \geq h/2$, en los límites $\Delta p_x = 0$, $\Delta x = \infty$, y $\Delta E = 0$, $\Delta t = \infty$.

Para poder tener una onda cuya amplitud varíe con x o t , se deben superponer varias ondas monocromáticas con longitudes de onda o frecuencias diferentes. Cuando se superponen dos ondas de ese tipo, se obtiene el fenómeno familiar de pulsos, como se vio anteriormente en esta sección, con la amplitud modulada de modo regular a todo tiempo y en todo el espacio. Si se desea construir una onda con extensión determinada en el espacio (un solo grupo con un principio y un fin específico), entonces se deberán superponer ondas senoidales que posean un espectro continuo de longitudes de onda en el intervalo $\Delta\lambda$. La amplitud de un grupo tal, será cero fuera de la región de tamaño Δx .

Para visualizar mejor lo anterior, considérese un número finito de ondas senoidales con longitudes de onda λ , o longitudes de onda recíproca κ , ligeramente diferentes. En la figura 3-9 se muestran siete ondas senoidales componentes $\Psi_{\kappa} = A_{\kappa} \cos 2\pi(\kappa x - \nu t)$, a tiempo $t = 0$. Las longitudes de onda recíprocas, $\kappa = 1/\lambda$ toman sólo los valores enteros desde $\kappa = 9$ hasta $\kappa = 15$. La amplitud de cada onda está dada por A_{κ} con $A_{12} = 1$, $A_{13} = A_{11} = 1/2$, $A_{14} = A_{10} = 1/3$, y $A_{15} = A_{19} = 1/4$, tal como se muestra en la figura. El esquema se centra en $x = 0$, donde todas las ondas están en fase (por esta razón se utilizan cosenos), pero ocurren desfases entre ellas, a medida que se desplazan de esa posición, en cualquier dirección. Consecuentemente, su suma $\Psi = \Psi_9 + \dots + \Psi_{15}$ oscila con máxima amplitud en $x = 0$, pero las oscilaciones decaen al aumentar o disminuir x a medida que las relaciones de fase entre las ondas componentes se complican. Se adopta la convención usual de definir la extensión del grupo entre el punto de máxima amplitud y aquel cuya amplitud es la mitad de la máxima, entonces la superposición contiene un grupo cuya extensión espacial Δx puede obtenerse de la figura y es ligeramente mayor que $2\pi/12$. Con una convención análoga, el intervalo de longitudes de onda recíprocas que comprenden el grupo de ondas, $\Delta\kappa$ tiene el valor 1. Obsérvese que el valor aproximado del producto $\Delta x \Delta\kappa$ es $\pi/6 \sim 1/2$. En el extremo derecho de la figura se indica la presencia de un grupo auxiliar, de la misma forma que el grupo central. Estos grupos auxiliares se forman en intervalos uniformemente espaciados a lo largo de las partes positiva y negativa del eje x y ocurren debido a que si se tiene un número finito de ondas componentes, existen puntos en el eje, separados de $x = 0$ por distancias iguales a un número entero diferente de longitudes de onda, para cada componente. En estos puntos las componentes están de nuevo en fase y el grupo se repite. Si en un intervalo fijo de longitudes de onda recíproca $\Delta\kappa$ se duplica el número de ondas componentes, la anchura del grupo central permanecerá esencialmente invariante, pero las distancias que lo separan de los grupos auxiliares se duplicará.

Si se combina un número infinito de ondas senoidales componentes, cada una con una longitud de onda recíproca infinitesimalmente diferente pero contenidas en el intervalo $\kappa = 9$ a $\kappa = 15$, se obtiene un grupo central muy similar al que se muestra en la figura 3-9, pero los grupos auxiliares no estarán presentes. La razón es que en tales casos no existe una longitud en el eje x en la cual encajen un número entero exacto de longitudes de onda para cada una del infinito número de componentes. Todas las componentes están en fase, en y cerca de $x = 0$ y por lo tanto se combinan constructivamente para formar el grupo. Alejándose de este punto en cualquier dirección, las ondas componentes empiezan a desfasarse entre sí, porque sus longitudes de onda o longitudes de onda recíproca son diferentes. Más allá de ciertos puntos, las fases del número infinito de componentes se vuelven aleatorias, y por lo tanto, la suma de las ondas componentes será cero. Además, nunca más volverá a estar en fase. Por lo tanto, las componentes forman un grupo de extensión restringida Δx . Resulta obvio que entre mayor sea el intervalo de longitudes de onda recíproca $\Delta\kappa$ de donde se obtienen las componentes que forman el grupo, menor será la extensión del grupo Δx , la razón es simplemente que si las longitudes de onda cubren un intervalo más amplio, las fases se volverán aleatorias en una distancia muy corta. De hecho, Δx es justamente inversamente proporcional a $\Delta\kappa$. El valor exacto de la constante de proporcionalidad y la forma del grupo de ondas, dependen de las amplitudes relativas de las ondas componentes.

**FIGURA 3-9**

Se muestra, a $t=0$, la superposición de siete ondas cosenoidales $\Psi_k = A_k \cos 2\pi(\kappa x - \nu t)$ con longitudes de onda recíprocas uniformemente espaciadas en el intervalo de $\kappa = 9$ a $\kappa = 15$. Sus amplitudes A_k se maximizan en el valor $A_{12} = 1$ para la onda cuya κ está en el centro del intervalo y decaen simétricamente a los valores $1/2$, $1/3$, $1/4$ para las otras ondas cuyas κ se aproximan a los extremos del intervalo. La suma $\Psi = \sum_k \Psi_k$

de estas ondas, consiste de un grupo centrado en $x = 0$. Definiendo Δx como la anchura entre la amplitud máxima y la mitad de la amplitud máxima de Ψ , y $\Delta \kappa$ se define como el intervalo de longitudes de onda recíprocas de las componentes de Ψ entre la amplitud máxima y la mitad de la amplitud máxima, se tiene $\Delta x \simeq 2\pi/12$, $\Delta \kappa \simeq 1$, y $\Delta x \Delta \kappa \simeq \pi/6 \simeq 1/2$.

Las matemáticas que se utilizan para llevar a cabo el procedimiento descrito, involucran la llamada integral de Fourier que es un poco más complicada, pero conducen a resultados numéricos muy similares a los obtenidos de la construcción de la figura 3-9. Es decir

$$\Delta x \Delta \kappa \geq 1/4\pi \quad (3-14)$$

El trabajo *óptimo* que pueda realizarse al formar un grupo de longitud Δx (amplitud media a la mitad de la altura) a partir de componentes cuyas longitudes de onda recíprocas cubren el intervalo $\Delta \kappa$ (mitad de la anchura a la mitad de la amplitud máxima) se obtiene $\Delta x = 1/4\pi \Delta \kappa$, o bien, $\Delta x \Delta \kappa = 1/4\pi$. Generalmente, de este producto se obtiene un valor algo mayor.

Un grupo de ondas que viaje en una región limitada del espacio pasará por algún punto de observación dado, en un tiempo limitado. Si el pulso o grupo de ondas tiene una duración t , entonces, necesariamente deberá componerse de ondas senoidales cuyas frecuencias cubran el intervalo $\Delta \nu$, donde

$$\Delta t \Delta \nu \geq 1/4\pi \quad (3-15)$$

Por lo tanto, la frecuencia del grupo tiene una dispersión $\Delta \nu$ si su duración es Δt , del mismo modo como existe una incertidumbre en su longitud de onda recíproca $\Delta \kappa$ si su anchura es Δx . La ecuación (3-15) también se obtiene de una integral de Fourier y con la ecuación (3-14), constituyen expresiones diferentes de la misma propiedad; sin embargo, para el estudiante será más familiar la relación frecuencia-tiempo o al menos algunas de sus implicaciones, como se muestra en el siguiente ejemplo.

Ejemplo 3-4. La señal de una estación de televisión consiste de pulsos cuya duración es $\Delta t \sim 10^{-6}$ seg. Explique por qué no es factible transmitir televisión en la banda AM.

El intervalo de frecuencias presentes en la señal, utilizando (3-15), es $\Delta \nu \sim 1/10^{-6} \text{ seg} = 10^6 \text{ seg}^{-1} = 10^6$ Hz. Por lo tanto, la banda de transmisión en su totalidad ($\nu \simeq 0.5 \times 10^6$ Hz a $\nu \simeq 1.5 \times 10^6$ Hz) sería capaz de aceptar un solo "canal" de televisión. También se tendrían problemas serios con la construcción de transmisores y receptores con una banda fraccional tan amplia. A las frecuencias que se utilizan en transmisión de televisión ($\nu \simeq 10^8$ Hz) se pueden tener muchos canales en una región razonable del espectro, y sólo se requiere una *banda nominal*. ◀

Las ecuaciones (3-14) y (3-15) son *propiedades universales de todas las ondas* y se aplican a las ondas de materia, en combinación con las relaciones de de Broglie-Einstein, inmediatamente se obtienen las relaciones de incertidumbre de Heisenberg. Es decir, si en

$$\Delta x \Delta \kappa = \Delta x \Delta(1/\lambda) \geq 1/4\pi$$

se sustituye $p = h/\lambda$ o $1/\lambda = p/h$,

$$\Delta x \Delta(p/h) = (1/h) \Delta x \Delta p \geq 1/4\pi$$

o

$$\Delta p \Delta x \geq h/2 \quad (3-16)$$

y si en

$$\Delta t \Delta \nu \geq 1/4\pi$$

se sustituye $E = h\nu$ o $\nu = E/h$, se obtiene

$$\Delta t \Delta(E/h) = (1/h) \Delta t \Delta E \geq 1/4\pi$$

o

$$\Delta E \Delta t \geq h/2 \quad (3-17)$$

Estos resultados concuerdan con las definiciones originales (3-5) y (3-6).

Resumiendo, se ha visto que en mediciones físicas, necesariamente se implica una interacción entre el observador y el sistema bajo observación. Para medidas de ese tipo, los entes disponibles son la materia y la radiación. Las relaciones $p = h/\lambda$ y $E = h\nu$, se aplican tanto a la radiación como a la materia, constituyendo así la expresión de la dualidad onda-partícula. Cuando estas relaciones se combinan con las propiedades universales a todas las ondas, se obtienen las relaciones de incertidumbre. Por lo tanto, el principio de incertidumbre es una consecuencia necesaria de esta dualidad, es decir, de las relaciones de de Broglie-Einstein; y el principio de incertidumbre en sí constituye la base de la tesis de Heisenberg-Bohr de que la probabilidad es fundamental para la física cuántica.

Ejemplo 3-5. Un átomo puede radiar en cualquier momento después de ser excitado. En un caso típico, se encuentra que la vida media de un átomo excitado promedio es de 10^{-8} seg. Es decir, durante este tiempo emite un fotón y sale de su estado de excitación.

(a) ¿Cuál es la incertidumbre $\Delta\nu$ mínima en la frecuencia del fotón?

De (3-15) se tiene

$$\Delta\nu\Delta t \geq 1/4\pi$$

$$\Delta\nu \geq 1/4\pi\Delta t$$

En $\Delta t = 10^{-8}$ seg, se obtiene $\Delta\nu \geq 8 \times 10^6 \text{ seg}^{-1}$.

(b) En átomos de sodio, la mayoría de los fotones corresponden a dos líneas espectrales de aproximadamente $\lambda = 5890 \text{ Å}$. ¿Cuál será la fracción de la amplitud $\Delta\nu/\nu$ correspondiente a cada línea?

Para $\lambda = 5890 \text{ Å}$ se obtiene $\nu = c/\lambda = 3 \times 10^{10} \text{ cm} \cdot \text{seg}^{-1} / 5890 \times 10^{-8} \text{ cm} = 5.1 \times 10^{14} \text{ seg}^{-1}$. Por lo tanto $\Delta\nu/\nu = 8 \times 10^6 \text{ seg}^{-1} / 5.1 \times 10^{14} \text{ seg}^{-1} = 1.6 \times 10^{-8}$ o aproximadamente 2 partes en 100 millones.

Esta es la llamada *amplitud natural* de la línea espectral. En la práctica, la línea es mucho más gruesa por ensanchamiento Doppler y el ensanchamiento por presión debidos al movimiento y a las colisiones de los átomos en la fuente.

(c) Calcule la incertidumbre en la energía ΔE , del estado excitado del átomo.

La energía del estado excitado no se puede medir con precisión ya que sólo se tiene un tiempo finito para realizar la medida. Es decir, el átomo no permanece en el estado excitado un tiempo infinito, sino que decae a su estado de más baja energía y en ese proceso emite un fotón. De acuerdo con el principio de conservación de la energía, la dispersión en la energía del fotón debe ser igual a la dispersión en la energía del estado excitado del átomo. Si Δt es igual a la vida media del estado excitado, de (3-17) se tiene

$$\begin{aligned} \Delta E &\geq \frac{h/4\pi}{\Delta t} = \frac{h}{4\pi\Delta t} = \frac{6.63 \times 10^{-34} \text{ joule} \cdot \text{seg}}{4\pi \times 10^{-8} \text{ seg}} \\ &= \frac{4.14 \times 10^{-15} \text{ eV} \cdot \text{seg}}{4\pi \times 10^{-8} \text{ seg}} \simeq 3.3 \times 10^{-8} \text{ eV} \end{aligned}$$

De modo que lo anterior concuerda con lo obtenido en la parte (a), multiplicando la incertidumbre en la frecuencia del fotón $\Delta\nu$ por h para obtener $\Delta E = h\Delta\nu$.

La dispersión en energía de un estado excitado, por lo general se le llama *amplitud* del estado.

(d) De los resultados anteriores, determine la energía del estado excitado del átomo de sodio, hasta una precisión ΔE , con respecto a la energía de su estado más bajo, que emite un fotón cuya longitud de onda está centrada en 5890 Å .

Se tiene $\Delta\nu/\nu = h\Delta\nu/h\nu = \Delta E/E$. Por lo tanto $E = \Delta E/(\Delta\nu/\nu) = 3.3 \times 10^{-8} \text{ eV} / 1.6 \times 10^{-8} = 2.1 \text{ eV}$, para el cual se han utilizado los cálculos de las partes (b) y (c). ◀

Ejemplo 3-6. Se hace una medida de la coordenada y de un electrón que pertenece a un ancho haz de electrones que se mueven en la dirección x , introduciendo en el haz una rendija angosta de amplitud Δy .

Demuestre que como resultado, se introduce una incertidumbre Δp_y en la componente y del impulso del electrón, de modo tal que $\Delta p_y \Delta y \geq h/2$, como lo requiere el principio de incertidumbre. Efectúe.o, considerando la difracción de la onda asociada con el electrón.

La onda, al propagarse por el aparato que se muestra en la figura 3-10, será difractada por la rendija. El ángulo θ correspondiente al primer mínimo del patrón de difracción de "una sola rendija", que se bosqueja en la figura, está dado por $\sin \theta = \lambda/\Delta y$. (Este es otro ejemplo de la relación general $\theta \simeq \lambda/a$ entre el ángulo de difracción, longitud de onda y dimensión característica del aparato de difracción). Como la propagación de la onda gobierna el movimiento de la partícula asociada, el patrón de difracción también da las probabilidades relativas de que los electrones lleguen a los diferentes puntos de la placa fotográfica. Por lo tanto, el electrón que pase por la rendija será deflelado por un ángulo que esté entre $-\theta$ y $+\theta$. A pesar de que su componente y del impulso había sido determinada con gran precisión igual a cero, antes de que pasara por la rendija (porque se sabía muy poco acerca de su posición y), después de atravesar la rendija, donde se realiza la medida de la posición y el impulso y puede ser cualquiera en el intervalo de $-p_y$ a $+p_y$, donde $\sin \theta = p_y/p$. De modo que la incertidumbre en el impulso y del electrón se debe a la medida de la posición y y por la difracción de la onda electrónica.

La incertidumbre es:

$$\Delta p_y \simeq p_y = p \sin \theta = p \lambda / \Delta y$$

Usando la relación de de Broglie $p = h/\lambda$ para conectar el impulso de la partícula con la longitud de onda de la onda, se obtiene:

$$\Delta p_y = h / \Delta y$$

o

$$\Delta p_y \Delta y = h$$

Este resultado concuerda con el límite impuesto por el principio de incertidumbre. La difracción, que implica ondas, y el principio de incertidumbre que se refiere a partículas, proveen modos alternativos aunque equivalentes de tratar éste y todos los problemas similares. ◀

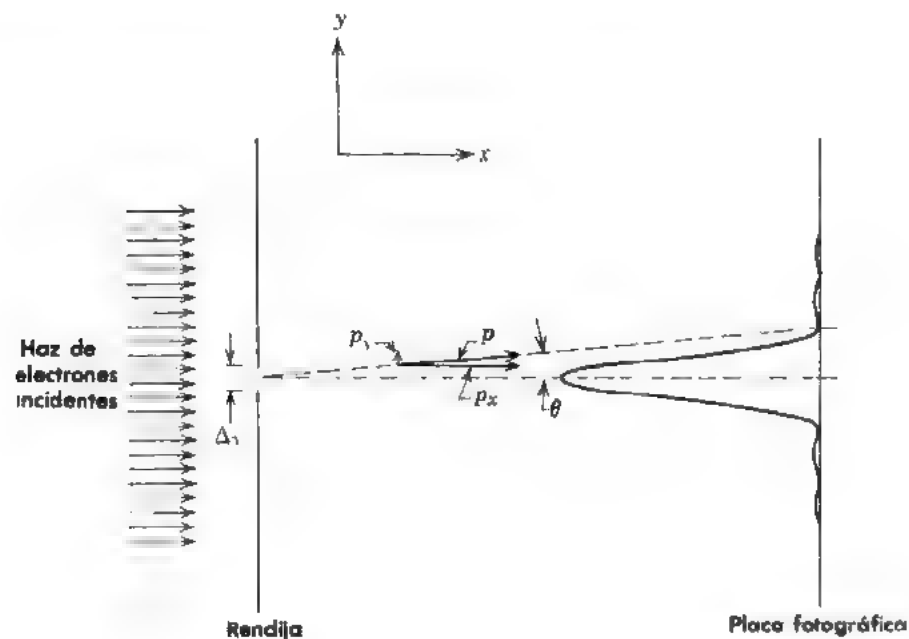


FIGURA 3-10

Medida de la coordenada y de un electrón en un haz paralelo y ancho, que se requiere que pase a través de una rendija. Se indica el patrón de difracción de la onda electrónica difractada, utilizando la línea que representa a la placa fotografiada, como un eje de la gráfica del patrón.

Obsérvese que en el ejemplo 3-6, se considera que la onda asociada con *un solo* electrón se difracta. La probabilidad de que el electrón pegue en algún punto de la placa fotográfica se determina por la intensidad de la onda electrónica. Si es sólo un electrón el que pasa por el aparato, podrá pegar en cualquier lugar del patrón de difracción, excepto en los puntos correspondientes a intensidad cero y seguramente pegará en algún punto cercano al máximo principal. Si son muchos los electrones que pasan por el aparato, cada una de sus ondas es difractada independientemente y los puntos sobre la placa fotográfica se distribuyen siguiendo el mismo patrón. El hecho de que los fenómenos de difracción impliquen interferencia entre partes diferentes de la onda correspondiente a una partícula y no a interferencia entre partes diferentes de ondas correspondientes a diferentes partículas, fue demostrado experimentalmente por primera vez, por G.I. Taylor para el caso de fotones y ondas de luz. Obtuvo un patrón de difracción utilizando luz de tan baja intensidad que los fotones pasaban por el aparato de difracción uno a uno, requiriendo para ello tiempos de exposición largos. Entonces, subiendo la intensidad a niveles normales de modo que hubiese muchos fotones en el aparato a cualquier tiempo, obtuvo el mismo patrón de difracción. Este mismo experimento ha sido esencialmente repetido posteriormente para electrones y otras partículas.

3.5 Algunas consecuencias del principio de incertidumbre

El principio de incertidumbre permite entender por qué es posible la naturaleza dual (onda-partícula) de la radiación y la materia. Si se trata de determinar experimentalmente, si la radiación es una onda o una partícula, se encuentra que un experimento que fuerce a la radiación a revelar su carácter ondulatorio, suprime fuertemente su carácter corpuscular. Si el experimento se modifica para que revele el carácter corpuscular, se suprimen las características ondulatorias. En una misma situación experimental, no es posible confrontar los aspectos ondulatorio y corpuscular. Tanto la radiación como la materia semejan monedas que pueden desplegar una u otra cara a voluntad, pero nunca ambas simultáneamente. Desde luego que esta es la esencia del principio de complementariedad de Bohr; los conceptos de onda y partícula en lugar de contradecirse, se complementan.

Considérese el experimento de Young, de interferencia de luz por dos rendijas. Desde el punto de vista ondulatorio, la onda original es dividida en dos frentes de onda coherentes por las rendijas, y el traslape de estos frentes de onda es lo que produce las franjas de interferencia en la pantalla, que son características de todo fenómeno ondulatorio. Ahora supóngase que se sustituye la pantalla por una superficie fotoeléctrica. Si se mide el lugar de la superficie donde son emitidos los fotoelectrones, se obtiene un patrón de intensidades correspondiente al de dos rendijas presentándose así, aparentemente, aspectos ondulatorios. Sin embargo, si se mide las distribuciones de energía y tiempo de los fotoelectrones emitidos, se obtienen evidencias que demuestran que la radiación consiste de fotones, de modo que los aspectos corpusculares parecerán estar presentes. Si después se piensa en la radiación como fotones cuyo movimiento está gobernado por las propiedades de propagación de ciertas ondas asociadas (de Broglie), se llega a otra paradoja aparente. Cada fotón deberá pasar por una u otra rendija; si este es el caso, ¿cómo es posible que su movimiento más allá de las rendijas sea influenciado por la interacción de sus ondas asociadas con una rendija por la cual no pasó?

El error en el razonamiento de la paradoja se encuentra en la afirmación de que el fotón debe pasar por una u otra rendija. ¿Cómo puede determinarse realmente, en un experimento, si un fotón que se detecta en la pantalla, pasó por la rendija de arriba o la de abajo? Para poderlo hacer sería necesario colocar un detector en cada rendija, pero el detector que interacciona con el fotón en la rendija lo saca de la trayectoria que de otra forma seguiría. Por el principio de incertidumbre, se puede demostrar que un detector que posea suficiente resolución espacial como para poder determinar por cuál rendija pasa el fotón, perturba tanto su impulso que destruye el patrón de interferencia por dos rendijas. En otras palabras, si de algún modo se

demuestra que el fotón pasó por una rendija o la otra, entonces ya no se tendrá un patrón de interferencia. Si se desea observar el patrón de interferencia, debe evitarse perturbar a los fotones y no tratar de observarlos como partículas a lo largo de sus trayectorias hacia la pantalla. Se puede observar el comportamiento ondulatorio o corpuscular de la radiación; sin embargo, el principio de incertidumbre impide que se observen ambos al mismo tiempo, de modo que este comportamiento dual en realidad no es contradictorio. Esto también es aplicable al comportamiento onda-partícula de la materia.

El principio de incertidumbre también hace evidente la necesidad de que los sistemas cuánticos se expresen en términos de probabilidad. En la mecánica clásica, si se conoce exactamente la posición y el impulso de cada partícula, en algún instante, en un sistema aislado, entonces se puede predecir el comportamiento exacto de las partículas del sistema, en todo tiempo futuro; sin embargo en mecánica cuántica, el principio de incertidumbre muestra que lo anterior es imposible de hacer en sistemas que implican distancias e impulsos pequeños, ya que es imposible saber con la precisión requerida, las posiciones e impulsos instantáneos de las partículas. Consecuentemente, sólo se podrán predecir comportamientos *probables* de estas partículas.

Ejemplo 3-7. Considere una partícula microscópica que se mueve libremente a lo largo del eje x . Suponga que en el instante $t = 0$, se mide la posición de la partícula con una incertidumbre Δx_0 . Calcule la incertidumbre en la posición de la partícula a un tiempo t posterior.

La incertidumbre en el impulso de la partícula, a $t = 0$, es al menos

$$\Delta p_x = \hbar/2\Delta x_0$$

Por lo tanto, la velocidad de la partícula, en ese instante, será incierta por lo menos

$$\Delta v_x = \Delta p_x/m = \hbar/2m\Delta x_0$$

y la distancia x que viajó la partícula en el tiempo t no podrá conocerse con mayor precisión que

$$\Delta x = t\Delta v_x = \hbar t/2m\Delta x_0$$

Si por una medida a $t = 0$, se localiza a la partícula dentro de un intervalo Δx_0 , entonces, si se realiza una medida de su posición al tiempo t , la partícula podría encontrarse en un intervalo al menos tan grande como Δx .

Obsérvese que Δx es inversamente proporcional a Δx_0 , de modo que entre más localizada esté la partícula en el instante inicial, será *menos* lo que se pueda saber de su posición final. Además, la incertidumbre Δx aumenta linealmente con el tiempo t . Esto corresponde a una dispersión, a medida que transcurre el tiempo del grupo de ondas asociado con el movimiento de la partícula. ◀

3.6 Filosofía de la teoría cuántica

A pesar de que existe un acuerdo entre todos los físicos, de que la teoría cuántica funciona en el sentido de que predice resultados que concuerdan en forma excelente con el experimento, existe una controversia cada vez mayor en cuanto a sus fundamentos filosóficos. Neils Bohr ha sido el principal arquitecto de la interpretación actual de la mecánica cuántica, conocida como la *interpretación de Copenhague*. Su enfoque ha sido apoyado por la gran mayoría de los físicos teóricos de hoy. Sin embargo, un grupo numeroso de físicos, no todos de acuerdo entre sí, han cuestionado la interpretación de Copenhague. El principal crítico de esta interpretación fue Albert Einstein. Los debates Einstein-Bohr constituyen una parte fascinante de la historia de la física. Bohr consideraba que había podido enfrentar todos los retos que inventó Einstein a manera de experimentos de pizarrón que tenían por objeto refutar el principio de incertidumbre.

Finalmente, Einstein aceptó que la teoría poseía consistencia lógica y su concordancia con los hechos experimentales, pero permaneció firme hasta el final, sin convencerse de que ello representara la realidad física última y dijo: "Dios no juega a los dados con el universo", refiriéndose a que la mecánica cuántica abandonaba los eventos individuales y la causalidad estricta, en favor de una interpretación fundamentalmente estadística.

Heisenberg ha afirmado el punto de vista comúnmente aceptado en forma concreta: "No hemos supuesto que la teoría cuántica, en forma opuesta a la teoría clásica, sea esencialmente una teoría estadística, en el sentido de que de los datos exactos sólo se puedan obtener conclusiones estadísticas. ... En la formulación de la ley causal, a saber, si sabemos el presente exactamente, podemos predecir el futuro, no es la conclusión sino la premisa la que es falsa. No *podemos* saber, como cuestión de principio, el presente en todos sus detalles".

Entre los críticos del punto de vista de Bohr-Heisenberg de una indeterminación fundamental en la física, está Louis de Broglie. En un prólogo a un libro de David Bohm, joven colega de Einstein cuyos intentos de una teoría nueva revivieron el interés por reexaminar las bases filosóficas de la teoría cuántica, de Broglie escribe: "Razonablemente podemos aceptar que la actitud adoptada, por más de 30 años, por físicos teóricos cuánticos es, al menos en apariencia, la contraparte exacta de la información del mundo atómico que nos ha dado la experimentación. Al nivel de investigación que se tiene actualmente en microfísica, es cierto que los métodos de medición, no nos permiten determinar simultáneamente todas las cantidades que serían necesarias para obtener una visión de los corpúsculos de tipo clásico (esto se puede deducir del principio de incertidumbre de Heisenberg) y que las perturbaciones introducidas por la medición, que son imposibles de eliminar, en general nos impiden predecir el resultado que producirán y permiten sólo predicciones estadísticas. Por lo tanto, la construcción de fórmulas puramente probabilísticas, que todos los teóricos usan actualmente, fue completamente justificada. Sin embargo, la mayoría de ellos, muchas veces bajo la influencia de ideas preconcebidas derivadas de la doctrina positivista, han pensado que podrían ir más allá y afirmar que el carácter incierto e incompleto del conocimiento que la experimentación, en su estado actual, nos provee de lo que realmente ocurre en microfísica, es el resultado de una indeterminación real de los estados físicos y su evolución. Tal extrapolación de ninguna manera parece ser justificada. Es posible que en el futuro, examinando a un nivel más profundo la realidad física, seamos capaces de interpretar las leyes de probabilidad y física cuántica como los resultados estadísticos del desarrollo de variables completamente determinadas que actualmente se encuentran ocultas a nosotros. Puede ser que los poderosos medios que empezamos a usar para romper la estructura nuclear y para que aparezcan nuevas partículas, nos den algún día un conocimiento directo que actualmente no tenemos a este nivel más profundo. Tratar de impedir todo intento de ir más allá del punto de vista actual sobre la física cuántica, podría ser muy peligroso para el progreso de la ciencia y además sería contrario a las lecciones que podemos aprender de la historia de la ciencia. En efecto, esto nos enseña que el estado actual de nuestro conocimiento es siempre provisional y que deben existir, más allá de lo que actualmente se conoce, inmensas regiones nuevas que descubrir". (*Tomado de Causality and Chance in Modern Physics* por David Bohm, © 1957 D. Bohm; reimpresso con permiso de D. Van Nostrand Co.).

El estudiante deberá notar aquí la aceptación de que la mecánica cuántica es correcta al nivel atómico y nuclear. La búsqueda de un nivel más profundo, donde la mecánica cuántica podría ser superada, es motivada mucho más por la objeción a su indeterminismo filosófico, que por otras consideraciones. De acuerdo con Einstein, "La creencia en un mundo externo independiente del sujeto que lo percibe es la base de toda la ciencia natural". Sin embargo, la mecánica cuántica considera las interacciones entre objeto y observador como la realidad última. Utiliza el lenguaje de las relaciones físicas y procesos en lugar de el de las cualidades y propiedades. Rechaza, por insignificante e inútil, el concepto de que detrás del universo de nuestra percepción se encuentre oculto un mundo objetivo gobernado por la causalidad; en cambio, se

confina a la descripción de las relaciones entre percepciones. De todas maneras, existen muchos que rehusan dejar de atribuir propiedades objetivas a las partículas elementales, por ejemplo, y trabajar con el conocimiento subjetivo acerca de ellas, lo cual motiva su investigación por una teoría nueva. De acuerdo con de Broglie, tal investigación es en el interés de la ciencia. Que lo anterior lleve a una nueva teoría que en algún campo actualmente inexplorado contradiga a la mecánica cuántica y altere también sus fundamentos filosóficos, nadie lo sabe.

PREGUNTAS

1. ¿Por qué la naturaleza ondulatoria de la materia no es más evidente en nuestras observaciones cotidianas?
2. ¿La longitud de onda de de Broglie solamente se aplica a "partículas elementales", tales como el electrón o el neutrón, o se aplica también a sistemas de materia complejos que poseen una estructura interna? Dé ejemplos.
3. Si en la fórmula de de Broglie, se hace $m \rightarrow \infty$, ¿se obtiene el resultado clásico para partículas macroscópicas?
4. ¿La longitud de onda de de Broglie puede ser menor que una dimensión lineal de la partícula? ¿Mayor? ¿Necesariamente existe una relación entre tales cantidades?
5. ¿La frecuencia de una onda de de Broglie se obtiene de E/h ? ¿La velocidad es igual a $\lambda\nu$? ¿La velocidad es igual a c ? Explique su respuesta:
6. ¿Se puede medir la frecuencia ν de una onda de de Broglie? Si la respuesta es afirmativa diga cómo.
7. ¿Cómo es que la difracción de electrones se puede utilizar para estudiar las propiedades de la superficie de un sólido?
8. ¿Cómo se explican los haces reflejados de modo regular en experimentos de difracción de electrones y átomos?
9. ¿Debe modificarse la fórmula de Bragg para electrones, para poder tomar en cuenta la refracción de ondas electrónicas en la superficie del cristal?
10. ¿Se obtiene una información diferente acerca de los cristales por medio de experimentos de difracción de electrones que por difracción de rayos X? ¿Dé experimentos de difracción de neutrones? Analícelo.
11. ¿Se podrían realizar estudios cristalográficos con protones? ¿con neutrones?
12. Analice la analogía: la óptica física es a la óptica geométrica como la mecánica ondulatoria es a la mecánica clásica.
13. ¿Es un electrón una partícula? ¿es una onda? Explique su respuesta.
14. ¿La longitud de onda de de Broglie asociada a una partícula del movimiento del sistema de referencia depende del observador? ¿Qué efectos tiene ésto, en la dualidad onda-partícula?
15. Dé ejemplos de cómo el proceso de medición perturba al sistema que se mide.
16. Demuestre la relación entre la naturaleza incontrolable del retroceso de Compton en el experimento del microscopio de rayos γ de Bohr y el hecho de que existen cuatro incógnitas y sólo tres ecuaciones de conservación en el efecto Compton.
17. Algunas veces, el principio de incertidumbre se enuncia en términos de cantidades angulares como $\Delta L_\phi \Delta \phi > \hbar/2$ donde ΔL_ϕ es la incertidumbre en una componente de impulso angular y $\Delta \phi$ es la

incertidumbre correspondiente a la posición *angular*. En algunos sistemas mecánico-cuánticos, al medirse el impulso angular se encuentra que su magnitud tiene un valor determinado (cuantizado) ¿Contradice esto esta definición del principio de incertidumbre?

18. A partir del principio de incertidumbre de Heisenberg, argumente por qué la energía más baja de un oscilador no puede ser cero.
19. Discuta diferencias y semejanzas entre ondas de materia y ondas electromagnéticas.
20. Explique cualitativamente los resultados del ejemplo 3-7, de que la incertidumbre en la posición de una partícula aumenta entre más exactamente se localice a la partícula inicialmente y que la incertidumbre aumenta con el tiempo.
21. ¿Se simplifica o se complica la física cuántica, por el hecho de que la interferencia ocurre entre varias partes de la onda asociada con *una sola* partícula (como en los experimentos de G.I. Taylor)?
22. Los juegos de azar contienen eventos gobernados por la estadística. ¿Violan esos juegos la determinación exacta de tales eventos? ¿Se viola la ley de causa y efecto?
23. De acuerdo con la filosofía operacional, si no se puede prescribir una operación factible para determinar una cantidad física, esa cantidad debería olvidarse por no tener significado físico. En su opinión, ¿cuáles son los méritos y las desventajas de este punto de vista?
24. Bohm y de Broglie sugieren que puede haber variables ocultas a un nivel más profundo que la teoría cuántica, que estén determinadas estrictamente. Obtenga una analogía con la relación entre la mecánica estadística y la ley de movimiento de Newton.
25. En su opinión, ¿existe una realidad física objetiva independiente de las impresiones sensoriales subjetivas? ¿Cómo contestarán esta pregunta los defensores de la interpretación de Copenhague? ¿Los críticos de la interpretación de Copenhague?
26. Las experiencias cotidianas ¿imitan en principio nuestros conceptos o sólo son el punto de arranque conceptual? ¿Cómo se relaciona esta pregunta con una solución a la dualidad onda-partícula?

PROBLEMAS

1. Una bala de 40g. viaja a 1000 m/seg. (a) ¿Qué longitud de onda se le puede asociar? (b) ¿Por qué no se revela la naturaleza ondulatoria de la bala por medio de efectos de difracción?
2. La longitud de onda de la emisión amarilla del sodio es 5890 Å. ¿A qué energía cinética tendría un electrón la misma longitud de onda de de Broglie?
3. Un electrón y un fotón tienen cada uno una longitud de onda de 2.0 Å. ¿Cuáles son sus (a) impulsos y (b) energías totales? (c) Compare las energías cinéticas del fotón y el electrón.
4. Un neutrón térmico tiene una energía cinética de $(3/2)kT$ donde T es la temperatura ambiente 300°K. Tales neutrones están en equilibrio térmico con alrededores normales. (a) ¿Cuál es la energía en electron volts de un neutrón térmico? (b) ¿Cuál será su longitud de onda de de Broglie?
5. Demuestre que la longitud de onda de de Broglie de una partícula, de carga e , masa en reposo m_0 , moviéndose a velocidades relativas, se obtiene como función del potencial de aceleración V , como

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_0eV}} \left(1 + \frac{eV}{2m_0c^2} \right)^{-1/2}$$

- b) Demuestre que esto concuerda con $\lambda = h/p$ en el límite no relativista.

6. Determine la energía, en electrón-volts, para la cual la expresión no relativista para la longitud de onda de de Broglie dará un error de 1%, para (a) un electrón y (b) un neutrón. (Sugerencia: ver el problema 5).
7. El acelerador de electrones de 50-GeV (i.e. 50×10^9 eV) de la Universidad de Stanford, proporciona un haz de electrones con longitud de onda muy corta, adecuados para sondear los detalles finos de la estructura nuclear, por medio de experimentos de dispersión. ¿Cuál es esta longitud de onda y cómo se compara con las dimensiones de un núcleo promedio? (Sugerencia: A estas energías, es más sencillo utilizar la relación relativista extrema entre la energía y el impulso, a saber $p = E/c$. Esta es la misma relación utilizada para fotones y se justifica siempre que la energía cinética de una partícula sea mucho mayor que su energía en reposo m_0c^2 , como en este caso).
8. Hacer una gráfica de longitud de onda de de Broglie contra la energía cinética para (a) electrones y (b) protones. Restrinja el intervalo de valores de la energía a aquellos en los cuales la mecánica clásica se aplica razonablemente bien. Un criterio conveniente es que la energía cinética en cada gráfica, sólo sea aproximadamente el 5% de la energía en reposo m_0c^2 de la partícula.
9. En el experimento de Davisson y Germer, (a) demuestre que los haces difractados de segundo y tercer orden que corresponden al primer máximo intenso de la figura 3-2, no pueden ocurrir, y (b) encuentre el ángulo al cual ocurrirá el haz difractado de primer orden, si se cambiara el potencial de aceleración de 54 a 60V (c) ¿Cuál será la diferencia de potencial necesaria para producir un haz difractado de segundo orden a 50° ?
10. ¿Cuál es la longitud de onda de un átomo de hidrógeno que se mueve con una velocidad correspondiente a la energía cinética promedio para equilibrio térmico a 20°C ?
11. El espaciado principal entre planos de un cristal de cloruro de potasio es 3.14 \AA . Compare el ángulo para una reflexión de Bragg de primer orden de estos planos, de electrones con energía cinética de 40 keV con el correspondiente a fotones de 40 keV.
12. Los electrones incidentes sobre un cristal sufren refracción debido a un potencial atractivo de aproximadamente 15V, que los cristales presentan a los electrones (debido a los iones en la red cristalina). Si el ángulo de incidencia de un haz de electrones es 45° y los electrones tienen una energía incidente de 100 eV, ¿cuál es el ángulo de refracción?
13. ¿Cuál sería el voltaje de aceleración necesario para que los electrones en un microscopio electrónico puedan obtener el mismo máximo poder de resolución que se podría obtener con un "microscopio de rayos γ " que utilice rayos γ de 0.2 MeV?
14. El poder de resolución más alto posible de un microscopio se limita solamente por la longitud de onda que utilice; es decir, el detalle más fino que puede ser separado es aproximadamente igual a la longitud de onda. Supóngase que se quiera "ver" dentro de un átomo. Suponiendo que el diámetro de un átomo es 1.0 \AA , esto quiere decir que es necesario resolver detalles con separación de aproximadamente 0.1 \AA , (a) Si se utiliza un microscopio electrónico, ¿cuál será la energía mínima de los electrones que se requieren? (b) Si se utiliza un microscopio de fotones, ¿cuál será la energía requerida de los fotones? ¿En qué región del espectro electromagnético se encuentran estos fotones? (c) ¿Qué microscopio resulta más práctico para este propósito? Explique su respuesta.

15. Demuestre que para una partícula libre, la relación de incertidumbre puede escribirse como:

$$\Delta\lambda\Delta x \geq \lambda^2/4\pi$$

donde Δx es la incertidumbre en la posición de la onda y $\Delta\lambda$ la incertidumbre simultánea en la longitud de onda.

16. Si $\Delta\lambda/\lambda = 10^{-7}$ para un fotón, ¿cuál es el valor simultáneo de Δx para (a) $\lambda = 5.00 \times 10^{-4} \text{ \AA}$ (rayos γ)? (b) $\lambda = 5.00 \text{ \AA}$ (rayos X)? (c) $\lambda = 5000 \text{ \AA}$ (luz)?
17. En una repetición del experimento de Thomson para medir e/m de un electrón, un haz de electrones de 104 eV se colima haciéndolo pasar por una rendija de anchura 0.50 mm. ¿Por qué no se destruye el carácter de haz de los electrones emergentes por difracción de la onda electrónica en la rendija?

18. Un electrón de 1 MeV deja una traza en una cámara de niebla. La traza es una serie de gotas de agua de aproximadamente 10^{-5} m de diámetro cada una. Demuestre de la razón de incertidumbre del impulso transversal al del impulso del electrón, que la trayectoria de los electrones no debería diferir mucho de una línea recta.
19. Demuestre que si la incertidumbre en la posición de una partícula, es aproximadamente igual a su longitud de onda de de Broglie, entonces la incertidumbre en su velocidad es igual a su velocidad.
20. (a) Demuestre que la incertidumbre más pequeña posible en la posición de un electrón cuya velocidad está dada por $\beta = v/c$ es

$$\Delta x_{\min} = \frac{h}{4\pi m_0 c} (1 - \beta^2)^{1/2} = \frac{\lambda_C}{4\pi} \sqrt{1 - \beta^2}$$

donde λ_C es la longitud de onda de Compton $h/m_0 c$. (b) ¿Cuál es el significado de esta ecuación para $\beta=0$? Para $\beta = 1$?

21. Un microscopio de fotones es utilizado para localizar un electrón dentro de una distancia de 0.2 \AA . ¿Cuál será la incertidumbre en la velocidad de un electrón localizado de este modo?
22. (a) Considere un electrón cuya posición está en algún lugar de un átomo de 1 \AA de diámetro. ¿Cuál es la incertidumbre en el impulso del electrón? ¿Es esto consistente con la energía de amarre de electrones en átomos? (b) Imagine que un electrón se encuentra en algún lugar dentro de un núcleo de diámetro 10^{-12} seg. ¿Cuál será la incertidumbre en el impulso del electrón? ¿Es esto consistente con la energía de amarre de los constituyentes nucleares? (c) Considere ahora un protón o un neutrón en ese núcleo. ¿Cuál será la incertidumbre en el impulso del neutrón o del protón? ¿Es esto consistente con la energía de amarre de los constituyentes nucleares?
23. La vida media de un estado excitado de un núcleo es, generalmente, 10^{-12} seg. ¿Cuál será la incertidumbre en la energía del fotón de rayos γ emitido?
24. Utilizando expresiones relativistas para la energía e impulso totales, verificar que la velocidad g de una onda de materia, es igual a la velocidad v de la partícula asociada.
25. La energía de un oscilador armónico lineal es $E = p_x^2/2m + Cx^2/2$. (a) Utilizando la relación de incertidumbre, demuestre que lo anterior se puede escribir como

$$E = \frac{h^2}{32\pi^2 m x^2} + \frac{Cx^2}{2}$$

(b) Después, demuestre que la energía mínima del oscilador es $h\nu/2$ donde

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{C}{m}}$$

es la frecuencia de oscilación (Sugerencia: este resultado depende de que el producto $\Delta x \Delta p_x$ alcance su valor máximo $\hbar/2$. Encuentre E en términos de Δx y Δp_x como en la parte (a), después minimice E con respecto a Δx o Δp_x en la parte (b). Observe que clásicamente, la energía mín.ma sería cero.

26. Un constructor de cinescopios para T.V. intenta mejorar la resolución de la imagen y al mismo tiempo mantener bajos los costos, diseñando un cañón electrónico que produce un haz electrónico que forma el punto más pequeño posible en la pantalla del tubo y utilizando solamente un cátodo emisor de electrones seguido por un sistema de aperturas bien espaciadas. (a) Demuestre que existe un diámetro óptimo para la segunda apertura. (b) Utilizando parámetros razonables de cinescopios de T.V., estime el tamaño mínimo del punto.
27. Un niño sobre una escalera de altura H , deja caer canicas de masa m al piso, tratando de pegarle a una fisura en el piso. Para apuntar, utiliza equipo de la más alta precisión. (a) Demuestre que las canicas no caerán en la fisura por una distancia del orden de $(\hbar/m)^{1/2} (H/g)^{1/4}$, donde g es la aceleración debida a la gravedad. (b) Utilizando parámetros razonables de H y m , evaluar esta distancia.

- 28.** Demuestre que con el fin de poder determinar por cuál rendija, de un sistema de doble rendija, pasa un fotón sin destruir el patrón de difracción de rendija doble, debe satisfacerse que $\Delta y \Delta p_y \ll \hbar/2$ (Como esta condición viola el principio de incertidumbre, no puede cumplirse.

Modelo atómico de Bohr

4.1	Modelo de Thomson	115
	Propiedades del modelo; partículas α ; dispersión múltiple; experimento de Geiger-Marsden; falla del modelo.	
4.2	Modelo de Rutherford	119
	Núcleos; trayectoria de las partículas α ; parámetro de impacto y distancia de máximo acercamiento; cálculo de Rutherford; comparación con el experimento de Geiger-Marsden; radios nucleares; definición de sección transversal diferencial; ángulo sólido; sección transversal de dispersión de Rutherford.	
4.3	La estabilidad del átomo nuclear	126
	Radiación por un cuerpo rígido clásico acelerado.	
4.4	Espectros atómicos	126
	Líneas espectrales; serie del hidrógeno; fórmula de Balmer; constante de Rydberg; serie de los alcalinos; espectros de absorción.	
4.5	Postulados de Bohr	129
	Enunciados de los postulados; cuantización del impulso angular orbital; estimación.	
4.6	Modelo de Bohr	130
	Cálculo de Bohr; radios de las órbitas; cuantización de la energía en el átomo monoeléctrico; comparación con la fórmula de Balmer; helio simplemente ionizado.	

114	MODELO ATOMICO DE BOHR	Cap. 4
4.7	Corrección por masa nuclear finita	136
	Masa reducida; evaluación de la constante de Rydberg; positronio; deuterio; átomo muónico.	
4.8	Estados de energía atómicos	139
	Experimento de Frank-Hertz; energía de ionización; estados del continuo.	
4.9	Interpretación de las reglas de cuantización	142
	Reglas de cuantización de Wilson-Sommerfeld; espacio fase y diagramas de fase; oscilador armónico simple; átomo monoelectrónico e interpretación de de Broglie; partícula en una caja unidimensional.	
4.10	Modelo de Sommerfeld	146
	Cuantización de las órbitas elípticas; números cuánticos principal y azimutal; degeneración; efecto de la relatividad; estructura fina del hidrógeno; constante de estructura fina; reglas de selección.	
4.11	El principio de correspondencia	149
	Enunciado del principio; justificación; oscilador armónico simple cargado; átomo de hidrógeno.	
1.12	Una crítica a la teoría cuántica antigua	151
	Recapitulación; fallas de la teoría cuántica antigua; en busca de un sustituto.	
	Preguntas	152
	Problemas	153

Modelo atómico de Bohr

4.1 Modelo de Thomson

Hacia el año 1910 existía mucha evidencia experimental de que los átomos contienen electrones (por ejemplo, dispersión de Rayos X por átomos, efecto fotoeléctrico, etc.). Esos experimentos proporcionan una estimación de Z , que es el número de electrones en un átomo y que aproximadamente es igual a $A/2$ donde A es el peso atómico químico del átomo que se trate. Puesto que normalmente los átomos son neutros, deberán contener carga positiva igual en magnitud a la carga negativa que proporcionan sus electrones. De esta manera, un átomo neutro tiene una carga negativa $-Ze$, donde $-e$ es la carga del electrón, y una carga positiva de la misma magnitud. El que la masa de un electrón sea muy pequeña, aún comparada con la masa del átomo más ligero, implica que la mayor parte de la masa del átomo deberá estar asociada con la carga positiva.

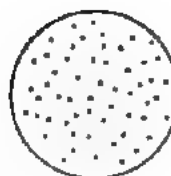
Naturalmente que estas consideraciones conducen al problema de la distribución, dentro del átomo, de las cargas positivas y negativas. J. J. Thomson propuso una descripción tentativa o *modelo* de un átomo según el cual los electrones cargados negativamente estaban localizados dentro de una distribución continua de carga positiva. Se suponía que la distribución de carga positiva era de forma esférica con un radio cuyo orden de magnitud era de 10^{-10} m que era el radio conocido para un átomo. (Valor que se puede obtener de la densidad de un sólido típico, su peso atómico y el número de Avogrado). Debido a su repulsión mutua, los electrones se deberían distribuir uniformemente en la esfera de carga positiva. La figura 4-1 ilustra este modelo del átomo llamado “pastel de pasas”. En un átomo en su estado de energía posible más bajo, los electrones deberían estar fijos en sus posiciones de equilibrio. En átomos excitados (por ejemplo, átomos en materiales a altas temperaturas), los electrones deberían vibrar alrededor de sus posiciones de equilibrio. Ya que la teoría electromagnética clásica predice que un cuerpo cargado acelerado, tal como un electrón vibrando, emite radiación electromagnética, era posible entender cualitativamente la emisión de dicha radiación por átomos excitados sobre la base del modelo de Thomson. Sin embargo, existía desacuerdo con los espectros observados experimentalmente.

Ejemplo 4-1. (a) Supóngase que existe un electrón de carga $-e$ en el interior de una región esférica con densidad de carga positiva uniforme ρ (un átomo de hidrógeno de Thomson). Demostrar que, de tener energía cinética, su movimiento será el de un oscilador armónico simple cuyo punto de equilibrio es el centro de la esfera.

Sea a la distancia a la que el electrón se desplaza de la posición de equilibrio donde a es menor que el radio de la esfera. Se conoce que mediante la ley de Gauss es posible calcular la fuerza sobre la carga si se utiliza la ley de Coulomb.

FIGURA 4-1

Modelo de Thomson del átomo-esfera de carga positiva con electrones incrustados.



$$F = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{4}{3} \pi a^3 \rho \right) \frac{e}{a^2} = -\frac{\rho e a}{3\epsilon_0}$$

donde $(4/3)\pi a^3 \rho$ es la carga positiva neta en una esfera de radio a . Por lo tanto se puede escribir $F = -ka$ donde la constante $k = \rho e/3\epsilon_0$. Si se libera al electrón en el punto a sin velocidad inicial, esta fuerza producirá un movimiento armónico simple a lo largo de un diámetro de la esfera, ya que siempre está dirigida hacia el centro y tiene una intensidad que es proporcional al desplazamiento desde el centro.

(b) Considérese que la carga total positiva tiene la magnitud de una carga electrónica (de modo que el átomo no tiene carga neta) y que se encuentra distribuida sobre una esfera de radio $r' = 1.0 \times 10^{-10}$ m.

Determinar la constante k de la fuerza y la frecuencia del movimiento del electrón

Se tiene

$$\rho = \frac{e}{\frac{4}{3} \pi r'^3}$$

de modo que

$$k = \frac{\rho e}{3\epsilon_0} = \frac{e}{\frac{4}{3} \pi r'^3} \frac{e}{3\epsilon_0} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r'^3}$$

$$= \frac{9.0 \times 10^9 \text{ nt}\cdot\text{m}^2/\text{coul}^2 \times (1.6 \times 10^{-19} \text{ coul})^2}{(1.0 \times 10^{-10} \text{ m})^3} = 2.3 \times 10^8 \text{ nt/m}$$

Entonces, la frecuencia del movimiento armónico simple es

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{2.3 \times 10^8 \text{ nt/m}}{9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}}} = 2.5 \times 10^{15} \text{ seg}^{-1}$$

Dado que la radiación emitida por el átomo (en analogía con la radiación emitida por los electrones que oscilan en una antena) tendrá esta misma frecuencia, que corresponderá a la longitud de onda

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{3.0 \times 10^8 \text{ m/seg}}{2.5 \times 10^{15} \text{ /seg}} = 1.2 \times 10^{-7} \text{ m} = 1200 \text{ Å}$$

que se encuentra en la región del espectro electromagnético correspondiente al violeta lejano. Es fácil demostrar que un electrón que se mueve en una órbita circular estable cuyo radio es menor que el radio del átomo de Thomson, revoluciona a la misma frecuencia y por lo tanto, también radiará a la misma frecuencia.

Por supuesto que la suposición de un radio diferente de la esfera de carga positiva daría una frecuencia diferente. Pero el hecho de que un átomo de hidrógeno de Thomson tenga solamente una frecuencia de emisión característica está en contraposición con el gran número de frecuencias diferentes que se observan en el espectro del hidrógeno.

En el año de 1911 Ernest Rutherford, anteriormente estudiante de Thomson, obtuvo del análisis de partículas α dispersadas por átomos pruebas definitivas de lo inadecuado del modelo de Thomson. El análisis de Rutherford demostró que la carga positiva no estaba distribuida en todo el átomo sino concentrada en una región muy pequeña: el núcleo del átomo. Este fue uno

de los desarrollos más importantes en la física atómica y fue el fundamento del material de estudio de la física nuclear.

Para entonces, Rutherford ya había sido galardonado con el premio Nobel de 1908 por "sus investigaciones concernientes al decaimiento de los elementos y... la química de las sustancias radiactivas". Fue un físico muy trabajador con gran talento, enorme iniciativa y confianza en sí mismo. En una carta escrita con posterioridad siendo ya Lord Rutherford, escribió: "Recientemente he leído algunos de mis primeros artículos y, Ud. sabe, cuando terminé me dije, Rutherford, mi muchacho, tú eras un tipo sumamente listo". Aunque complacido por haber ganado un premio Nobel, prefería el que hubiera sido en física y no en química. (En aquel entonces cualquier investigación sobre los elementos se consideraba en el terreno de la química). En su discurso en el que aceptó el premio, mencionó que durante su trabajo con radiactividad, había observado muchas transformaciones, pero nunca había visto una tan rápida como la suya propia, de físico a químico.

Rutherford supo que las partículas alfa eran átomos de helio doblemente ionizados (es decir, átomos de He sin dos electrones), que eran emitidos espontáneamente y a gran velocidad por varios materiales radiactivos. En la figura 4-2 se muestra un arreglo experimental utilizado por él y sus colegas para estudiar la dispersión de partículas alfa al pasar a través de láminas delgadas de varias sustancias. La fuente radiactiva emite partículas alfa que son colimadas mediante un par de diafragmas en un fino haz paralelo, el cual incide sobre una hoja de alguna sustancia usualmente metálica. La lámina es tan delgada que las partículas pasan completamente a su través perdiendo muy poco de su velocidad. Sin embargo, al atravesar la lámina cada una de las partículas α experimenta muchas deflexiones pequeñas debido a la fuerza de Coulomb que actúa debido a su carga y las cargas positivas y negativas de los átomos de la lámina. Puesto que la deflexión de una partícula alfa al pasar a través de un solo átomo depende de los detalles de su trayectoria a través de éste, la deflexión total al pasar a través de la laminilla completa será diferente para las diferentes partículas alfa en el haz. En consecuencia el haz emergerá de la hoja como un haz divergente y no como un haz paralelo. Midiendo el número de partículas α dispersadas en cada intervalo angular entre Θ y $\Theta + d\Theta$ es posible obtener una medida cuantitativa de su divergencia. El detector de partículas alfa consiste de un microscopio y una película del compuesto ZnS cristalino. El cristal de ZnS tiene la propiedad de producir un pequeño destello luminoso al ser golpeado por una partícula α y al observar con el microscopio es posible distinguir el destello proveniente de la incidencia de una partícula α . En el experimento un observador cuenta el número de destellos luminosos producidos por unidad de tiempo como función de la posición angular del detector.

Si se denota con N al número de átomos que deflexionan a una partícula α en su paso a través de la hoja, con θ el ángulo de deflexión al pasar a través de un átomo (véase figura 4-3) y con Θ la

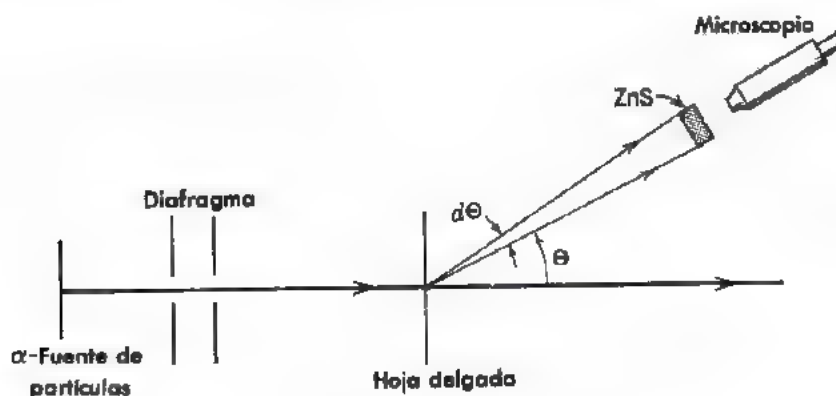
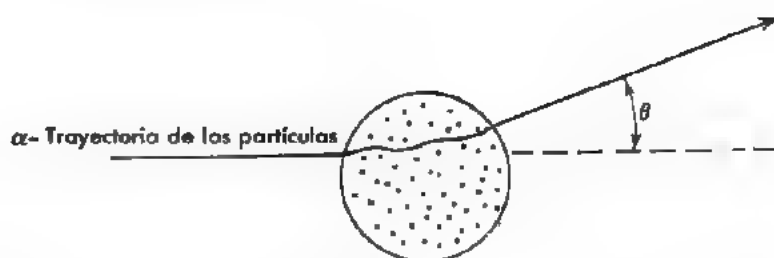


FIGURA 4-2

Arreglo para un experimento de dispersión de partículas α . La región por la que viajan las partículas α se encuentra al vacío.

**FIGURA 4-3**

Una partícula α pasando a través de un átomo según el modelo de Thomson. El ángulo θ especifica la deflexión de la partícula.

deflexión total al pasar a través de todos los átomos en su trayectoria por el interior de la hoja, se puede demostrar mediante la teoría estadística que

$$(\overline{\Theta^2})^{1/2} = \sqrt{\mathcal{N}} (\overline{\theta^2})^{1/2} \quad (4-1)$$

Aquí $(\overline{\Theta^2})^{1/2}$ es la raíz media cuadrática de la deflexión total o del ángulo de dispersión y $(\overline{\theta^2})^{1/2}$ es la raíz media cuadrática del ángulo de dispersión en una deflexión por un solo átomo. El factor $\sqrt{\mathcal{N}}$ proviene de la aleatoriedad de la deflexión; si todas las deflexiones fueran en la misma dirección, se debería obtener \mathcal{N} en lugar de $\sqrt{\mathcal{N}}$. De manera más general, la teoría estadística predice para las partículas α dispersadas la distribución angular siguiente

$$N(\Theta) d\Theta = \frac{2I\Theta}{\Theta^2} e^{-\Theta^2/\Theta^2} d\Theta \quad (4-2)$$

donde $N(\Theta) d\Theta$ es el número de partículas α dispersadas dentro del intervalo angular de Θ a $\Theta + d\Theta$, e I es el número de α que pasan por la hoja.

Debido a que los electrones tienen una masa muy pequeña comparada con la de la partícula α son capaces de producir solamente una deflexión muy pequeña a éstas. El átomo de Thomson no es capaz de proporcionar una repulsión debido a la fuerza de Coulomb lo suficientemente intensa para producir una deflexión considerable de las partículas α ya que la carga positiva está distribuida sobre todo el volumen del átomo de radio $r' \simeq 10^{-10}$ m. En efecto, usando el modelo de Thomson se encuentra que la deflexión causada por un átomo es $\theta \leq 10^{-4}$ rad. Este resultado, (4-1) y (4-2) constituyen las predicciones que sobre la dispersión de partículas α hace el modelo de Thomson, mismas que fueron comprobadas por Rutherford y su grupo.

Ejemplo 4-2. (a) En un experimento típico (Geiger y Marsden, 1909) las partículas α eran dispersadas por una laminilla de oro de 10^{-6} m de espesor. Se encontró que el promedio del ángulo de dispersión era $(\overline{\Theta^2})^{1/2} \simeq 1^\circ \simeq 2 \times 10^{-2}$ rad. Calcular $(\overline{\theta^2})^{1/2}$.

El número de átomos atravesados por la partícula α es aproximadamente igual al espesor de la laminilla dividido entre el diámetro del átomo. Así

$$\mathcal{N} \simeq 10^{-6} \text{ m} / 10^{-10} \text{ m} = 10^4$$

De (4-1) se obtiene que el ángulo de deflexión promedio al atravesar un solo átomo, es

$$(\overline{\theta^2})^{1/2} = \frac{(\overline{\Theta^2})^{1/2}}{\sqrt{\mathcal{N}}} \simeq \frac{2 \times 10^{-2}}{10^2} \simeq 2 \times 10^{-4} \text{ rad}$$

que concuerda con la estimación hecha mediante el modelo de Thomson $\theta \leq 10^{-4}$ rad.

(b) Más del 99% de las partículas α fueron dispersadas a ángulos menores de 3° . Las mediciones en las que se utilizaron 1° para $(\Theta^2)^{1/2}$, concordaron con (4-2) para $N(\Theta)d\Theta$ para ángulos Θ en este intervalo, pero la distribución angular para las pocas partículas dispersadas a ángulos mayores estaban en flagrante desacuerdo con (4-2). Por ejemplo, se encontró que la fracción de α dispersadas a ángulos mayores de 90° , $N(\Theta > 90^\circ)/I$, fue alrededor de 10^{-4} . ¿Qué es lo que predice (4-2)?

Se tiene

$$\frac{N(\Theta > 90^\circ)}{I} = \frac{\int_{90^\circ}^{180^\circ} N(\Theta) d\Theta}{I} = e^{-(90)^\circ} = 10^{-3500}$$

un resultado totalmente diferente del valor experimental de 10^{-4} .

En general se observó que el número de partículas α dispersadas era *mucho* mayor que el número predicho para todos los ángulos de dispersión mayores a unos cuantos grados.

La existencia de una probabilidad pequeña pero diferente de cero para la dispersión a ángulos grandes, no podía explicarse en términos del modelo de Thomson, el cual básicamente incluía ángulos de dispersión *pequeños* provenientes de *muchos* átomos. Para los científicos acostumbrados a pensar en términos de este modelo resultó una gran sorpresa que algunas partículas α resultaran deflectadas a ángulos muy grandes, cercanos a 180° . En palabras de Rutherford: "fue el evento más increíble que me haya pasado en mi vida. Fue tan increíble como el que usted lanzara una bala de 15 pulgadas a un papel sanitario y ésta regresara y lo golpeará".

En los experimentos en los que se utilizaban hojas de varios espesores se demostró que el número de dispersiones a ángulos grandes era proporcional a N , al número de átomos atravesados por la partícula α . Esta es justamente la dependencia que se obtendría si existiera una probabilidad pequeña para que una partícula α fuera dispersada a través de un ángulo *grande* al atravesar un *solo* átomo. Esto no podía suceder en el modelo de Thomson y fue lo que condujo a Rutherford en 1911 a proponer un nuevo modelo.

4.2 Modelo de Rutherford

En el modelo de Rutherford de la estructura del átomo, se supone que toda la carga positiva del átomo, y en consecuencia esencialmente toda su masa, se encuentra concentrada en una región del espacio pequeña localizada en el centro y denominada *núcleo*. Si las dimensiones del núcleo son suficientemente pequeñas, una partícula α que pase muy cerca de él puede ser dispersada a un ángulo grande al atravesar un *solo* átomo gracias a una repulsión debida a su carga que es muy intensa. Si, en vez de utilizar $r' = 10^{-10}$ m para el radio de la distribución de carga positiva del modelo de Thomson, que conduce a un ángulo de deflexión máximo $\theta \simeq 10^{-4}$ rad, nos preguntamos cuál debería ser el radio r' de un núcleo para obtener, por ejemplo $\theta \simeq 1$ rad, se encontrará $r' = 10^{-14}$ m y esto, como se verá, resultará ser una buena estimación del radio del núcleo atómico.

Rutherford hizo un cálculo detallado de la distribución angular que se esperaría para la dispersión de partículas α por átomos del tipo de los propuestos en su modelo, estos cálculos únicamente comprendían la dispersión a ángulos mayores de unos cuantos grados; por lo tanto era posible ignorar las dispersiones debidas a electrones atómicos. Entonces, la dispersión se debe a la fuerza de Coulomb repulsiva que actúa entre la partícula α cargada positivamente y el núcleo con carga del mismo signo. Además, en los cálculos solamente se consideraban dispersiones provocadas por átomos pesados con objeto de permitir la suposición de que la masa del núcleo es tan grande comparada con la de la partícula α que aquel no retrocede en forma apreciable (permanece fijo en el espacio) durante el proceso de dispersión. También se supuso que la partícula α no penetraba en la región nuclear, de manera que tanto la partícula como el núcleo (ambas supuestamente esféricas) se comportaban, desde el enfoque de la fuerza de

Coulomb, como cargas puntuales. Como se verá posteriormente estas suposiciones son perfectamente válidas excepto para la dispersión de partículas α por átomos ligeros y en tales casos será posible corregir mediante un valor finito para la masa nuclear. Finalmente, en estos cálculos se utiliza la mecánica no-relativista, ya que $v/c \simeq 1/20$.

La figura 4-4 muestra la dispersión de una partícula α de carga $+ze$ y masa M , al pasar en la proximidad de un núcleo de carga $+Ze$. El núcleo está fijo en el origen del sistema de coordenadas. Cuando la partícula se encuentra muy lejos del núcleo la fuerza de Coulomb que actúa sobre ella es muy pequeña, de manera que la partícula se aproxima al núcleo a lo largo de una línea recta con rapidez constante v . Después de la dispersión, la partícula se moverá, a partir de cierta distancia desde el núcleo, a lo largo de una línea recta y con rapidez constante v' . La posición de la partícula con relación al núcleo queda especificada por la coordenada radial r y el ángulo polar φ , medido a partir de un eje paralelo a la trayectoria inicial. La distancia perpendicular de este eje a la línea correspondiente al movimiento inicial se conoce con el nombre de *parámetro de impacto* y se denota por b . El ángulo de dispersión θ es justamente el ángulo entre el eje y una línea trazada desde el origen y paralela a la línea del movimiento final; b' es la distancia perpendicular entre estas dos líneas.

Ejemplo 4-3. Demostrar que $v = v'$ y $b = b'$.

Por ser una fuerza de Coulomb, la fuerza que actúa sobre la partícula siempre se encuentra en la dirección radial y por lo tanto el impulso angular de la partícula alrededor del origen tiene un valor constante L . Entonces el impulso angular inicial es igual al impulso angular final, es decir

$$Mvb = Mv'b' = L$$

Por supuesto que la energía cinética de la partícula no se mantiene constante durante la dispersión, pero la energía cinética inicial deberá ser igual a la energía cinética final ya que se ha supuesto que el núcleo permanece en reposo. Entonces

$$\frac{1}{2} Mv^2 = \frac{1}{2} Mv'^2$$

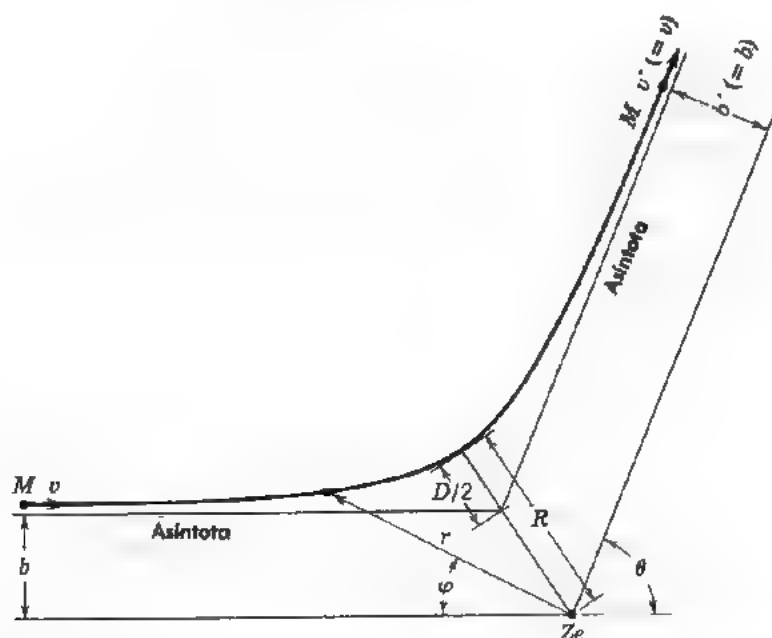


FIGURA 4-4

Trayectoria hiperbólica seguida en el modelo de Rutherford, mostrando las coordenadas r, φ y los parámetros b, D . Estos dos parámetros determinan completamente la trayectoria, en particular el ángulo de dispersión θ y la distancia de máximo acercamiento R . La carga puntual nuclear Ze en un foco de la rama de la hipérbola.

Por lo que, $v = v'$ y de la relación anterior $b = b'$, tal como se dibujó en la figura 4-4. ◀

Mediante un cálculo directo según la mecánica clásica y utilizando la fuerza de Coulomb repulsiva $(1/4\pi\epsilon_0)(zZe^2/r^2)$, se obtiene la ecuación para la trayectoria de la partícula α (véase el apéndice D)

$$\frac{1}{r} = \frac{1}{b} \sin \varphi + \frac{D}{2b^2} (\cos \varphi - 1) \quad (4-3)$$

que es la ecuación de una hipérbola en coordenadas polares. Donde D es una constante definida por

$$D \equiv \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{zZe^2}{Mv^2/2} \quad (4-4)$$

que resulta ser un parámetro conveniente y numéricamente igual a la *distancia de máximo acercamiento* al núcleo en una colisión frontal ($b=0$). Esto se obtiene de considerar que a esta distancia la energía potencial $(1/4\pi\epsilon_0)(zZe^2/D)$ es igual a la energía cinética inicial $Mv^2/2$ igualando y resolviendo para D . En este punto la partícula se detendrá e invertirá la dirección de su movimiento. El ángulo de dispersión θ se determina de (4-3) evaluando el valor de φ cuando $r \rightarrow \infty$ y haciendo $\theta = \pi - \varphi$. Así se obtiene

$$\cot \frac{\theta}{2} = \frac{2b}{D} \quad (4-5)$$

Ejemplo 4-4. Evaluar R que es la distancia de máximo acercamiento de la partícula al centro del núcleo (el origen en la figura 4-4).

La coordenada radial r será igual a R cuando el ángulo polar sea $\varphi = (\pi - \theta)/2$. Evaluando (4-3) para este ángulo se obtiene

$$\frac{1}{R} = \frac{1}{b} \sin \left(\frac{\pi - \theta}{2} \right) + \frac{D}{2b^2} \left[\cos \left(\frac{\pi - \theta}{2} \right) - 1 \right]$$

Y de (4-5) se tiene

$$b = \frac{D}{2} \cot \frac{\theta}{2} = \frac{D}{2} \tan \left(\frac{\pi - \theta}{2} \right)$$

lo cual, después de algunas simplificaciones conduce a

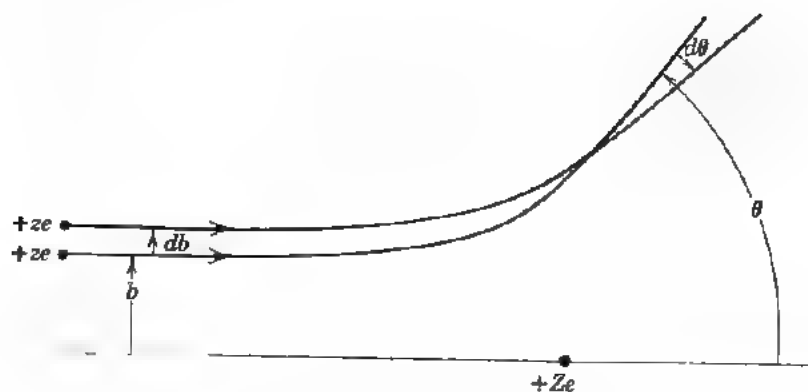
$$R = \frac{D}{2} \left[1 + \frac{1}{\cos \left(\frac{\pi - \theta}{2} \right)} \right]$$

o

$$R = \frac{D}{2} \left[1 + \frac{1}{\sin (\theta/2)} \right] \quad (4-6)$$

Resultado que se puede checar físicamente. Obsérvese que cuando $\theta \rightarrow \pi$, lo que corresponde a $b = 0$, es decir una colisión frontal, $R \rightarrow D$, la distancia de máximo acercamiento. Además y como era de esperarse, $\theta \rightarrow 0$, corresponde a una deflexión nula y por lo tanto b y R tienden a infinito. ◀

En la figura (4-5) se puede observar que para el caso de la dispersión de una partícula α por un solo núcleo, si el parámetro de impacto está en el intervalo entre b y $b + db$, el ángulo de

**FIGURA 4-5**

Relación entre el parámetro de impacto b y el ángulo de dispersión θ . Al aumentar b (alejarse del núcleo) el ángulo θ decrece (menor ángulo de dispersión). Las partículas α con parámetro de impacto entre b y $b + db$ son dispersadas en el intervalo angular entre θ y $\theta + d\theta$.

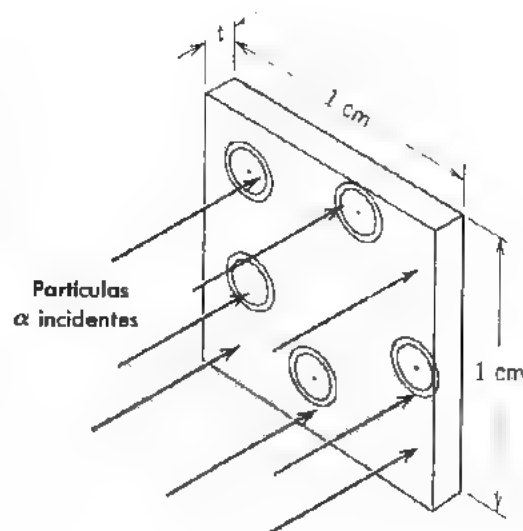
dispersión está en el intervalo entre θ y $\theta + d\theta$, donde la relación entre b y θ está dada por la ecuación (4-5). El problema de calcular el número $N(\Theta) d\Theta$ de partículas α dispersadas en el intervalo angular Θ y $\Theta + d\Theta$ al atravesar la laminilla completa es equivalente al problema de calcular el número de partículas que inciden con un parámetro de impacto entre b y $b + db$. Como se mostrará en el ejemplo siguiente, el resultado es

$$N(\Theta) d\Theta = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \left(\frac{zZe^2}{2Mv^2} \right)^2 I \rho t 2\pi \frac{\sin \Theta d\Theta}{\sin^4 (\Theta/2)} \quad (4-7)$$

donde I es el número de partículas α que inciden sobre una laminilla de espesor t cm y que contiene ρ núcleos por centímetro cúbico.

Ejemplo 4-5. Verifíquese la ecuación (4-7).

Considérese, como se muestra en la figura 4-6, un segmento de la laminilla con área de sección transversal de 1 cm^2 . Alrededor de un eje que pasa por cada núcleo se traza un anillo con radio interno b y radio externo $b + db$, siendo el área de cada uno de los anillos $2\pi b db$. El número de estos anillos en este

**FIGURA 4-6**

Haz de partículas α que inciden sobre una laminilla de 1 cm^2 de área y espesor t cm. Los anillos que son simplemente construcciones geométricas y sin significado físico, están centrados en los núcleos. En realidad, existen muchos más anillos de los mostrados y son más pequeños.

segmento de la hoja es ρt . La probabilidad de que una partícula α pase a través de uno de estos anillos, $P(b) db$, es igual al área total cubierta por los anillos dividida entre el área total del segmento. Se supone que la laminilla es lo suficientemente delgada como para ignorar el traslapamiento de los anillos correspondientes a núcleos diferentes. El proceso involucra *dispersión simple* y la probabilidad de dispersión por más de un núcleo se considera muy pequeña. Por lo tanto

$$P(b) db = \rho t 2\pi b db$$

pero $b = (D/2) \cot(\theta/2)$ así que

$$db = - \frac{D}{2} \frac{d\theta/2}{\sin^2(\theta/2)}$$

$$b db = - \frac{D^2 \cos(\theta/2) d\theta}{8 \sin^3(\theta/2)} = - \frac{D^2 \sin \theta d\theta}{16 \sin^4(\theta/2)}$$

Entonces

$$P(b) db = - \frac{\pi}{8} \rho t D^2 \frac{\sin \theta d\theta}{\sin^4(\theta/2)}$$

Pero $-P(b)db$ es igual a la probabilidad de que las partículas incidentes sean dispersadas en un intervalo angular entre θ y $\theta + d\theta$. El signo menos proviene del hecho de que un decremento en b , es decir, $-db$, corresponde a un incremento en θ es decir, $+d\theta$. Utilizando la notación anterior, Θ para el ángulo de dispersión al pasar a través de la laminilla completa.

$$\frac{N(\Theta) d\Theta}{I} = -P(b) db = \frac{\pi}{8} \rho t D^2 \frac{\sin \Theta d\Theta}{\sin^4(\Theta/2)}$$

Por último, con $D = (1/4\pi\epsilon_0)zZe^2/(Mv^2/2)$, se obtiene (4-7).

Si se comparan los resultados (4-7) del modelo de Rutherford con los del modelo de Thomson (4-2) se observa que no obstante que en ambos el factor angular decrece rápidamente al crecer el ángulo, el decremento es bastante más lento para las predicciones de Rutherford. Las dispersiones a ángulos grandes son mucho más probables en una dispersión simple por un átomo con núcleo que en dispersiones múltiples a ángulos pequeños por un átomo de "pastel de pasas". A los pocos meses de la derivación de la ecuación (4-7), Geiger y Marsden llevaron a cabo experimentos detallados con objeto de probarla; los resultados que obtuvieron fueron:

1 Se comprobó la dependencia angular, utilizando laminillas de Ag y Au, en el intervalo de 5° a 150° . No obstante que $N(\Theta)d\Theta$ varía en este intervalo por un factor de aproximadamente 10^5 , los datos experimentales se mantienen, proporcionales a la distribución angular teórica dentro de un porcentaje pequeño.

2 Se encontró que la cantidad $N(\Theta)d\Theta$ era efectivamente proporcional al espesor t de la hoja para un intervalo de aproximadamente 10 pulgadas de espesor para todos los elementos investigados.

3 La ecuación (4-7) predice que el número de partículas α dispersadas será inversamente proporcional al cuadrado de su energía cinética, $Mv^2/2$. Esto se comprobó utilizando partículas α provenientes de distintas fuentes radiactivas y la dependencia con la energía cinética predicha se confirmó experimentalmente con una variación en la energía disponible de alrededor de un factor de 3.

4 Por último, la ecuación predice que $N(\Theta)d\Theta$ es proporcional a $(Ze)^2$, el cuadrado de la carga nuclear. En aquel entonces Z no era conocida para varios átomos. Suponiendo válida la ecuación (4-7), los experimentos se utilizaron para determinar Z y se encontró que ésta era igual al número atómico de los átomos blanco. Esto implicaba que el primer átomo en la tabla

periódica, H, contenía un electrón; el segundo, He, contenía dos electrones; el tercero, Li, contenía tres etc, ya que Z también es el número de los electrones en el átomo neutro. Este resultado fue comprobado de manera independiente por técnicas de rayos X y que se analizarán en el capítulo 9.

Una vez comprobado su modelo, Rutherford fue capaz de poner límites al tamaño del núcleo. La distancia de máximo acercamiento D es el menor valor que puede tomar R y que ocurre para $\Theta = 180^\circ$. Entonces

$$R_{180^\circ} = D = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{zZe^2}{Mv^2/2}$$

El radio del núcleo no puede ser mayor que D debido a que los resultados están basados en la suposición de que la fuerza que actúa sobre la partícula α siempre es estrictamente una fuerza de Coulomb entre dos cargas puntuales. Suposición que no sería cierta si la partícula penetrara a la región nuclear en su distancia de máximo acercamiento. La ecuación anterior demuestra que R_{180° decrece conforme Z decrece y surge la pregunta: ¿Qué tanto puede decrecer R_{180° antes de que sea menor que el radio del núcleo? Para núcleos muy ligeros se observaron discrepancias con las dispersiones predichas por Rutherford. Parte de ellas debidas a la violación que existe para núcleos muy ligeros a la suposición de que la masa nuclear es grande comparada con la masa de la partícula α ; sin embargo, aún tomando en cuenta el valor finito de la masa nuclear subsisten las discrepancias. Lo cual sugiere que la penetración del núcleo ocurre en estos casos alterando las dispersiones predichas. Por lo tanto, el radio nuclear se puede definir como el valor de R para el ángulo de dispersión límite, o la energía límite incidente, para el cual aparece la discrepancia con la teoría de Rutherford. Por ejemplo, en la figura (4-7) se muestran los datos obtenidos por el grupo de Rutherford para la dispersión de partículas α de distintas energías y para un ángulo grande y fijo cuando la laminilla blanco era Al. La ordenada es la relación del número de partículas dispersadas observado, al número predicho por la teoría de Rutherford (corregido por la masa nuclear finita). La abscisa es la distancia de máximo acercamiento calculada a partir de (4-6). Estos datos implican que el radio del núcleo de Al es alrededor de $10^{-14}\text{m} = 10\text{ F}$. (La unidad de distancia utilizada en física nuclear es el *Fermi*, que es igual a 10^{-15} m . Nótese que un $\text{F} = 10^{-5}\text{ \AA}$, donde \AA , el angstrom es la unidad utilizada en física atómica).

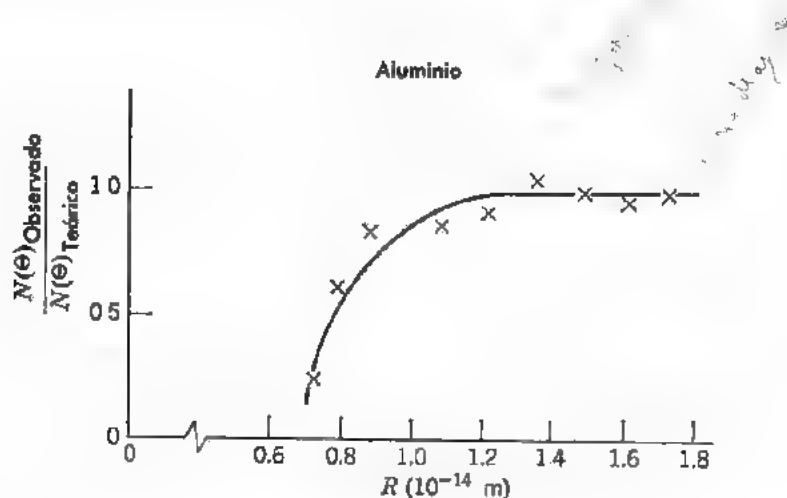


FIGURA 4-7

Algunos de los datos obtenidos en la dispersión por aluminio de partículas α provenientes de una fuente radiactiva. La abscisa es la distancia de máximo acercamiento al núcleo central.

La fórmula de dispersión de Rutherford (4-7) por lo general se expresa en términos de una *sección transversal diferencial* $d\sigma/d\Omega$. Esta cantidad se define de manera que el número dN de partículas dispersadas dentro de un ángulo sólido $d\Omega$ al ángulo de dispersión Θ es

$$dN = \frac{d\sigma}{d\Omega} I n d\Omega \quad (4-8)$$

si I partículas α inciden sobre una hoja blanco que contiene n núcleos por cm^2 . La definición es análoga a la definición de sección transversal σ en (2-18)

$$N = \sigma I n$$

Esto se ilustra en la figura 4-8. El *ángulo sólido* $d\Omega$, que esencialmente es un intervalo angular bidimensional, se mide numéricamente por el área cubierta por el intervalo angular sobre una esfera de radio unidad con centro en el lugar en el que ocurre la dispersión. Para la dispersión de Rutherford que es simétrica alrededor del eje del haz incidente, es importante el ángulo sólido $d\Omega$ que corresponde a todos los eventos en los cuales el ángulo de dispersión se encuentra en el intervalo $d\Theta$ a Θ . Como se muestra en la figura

$$d\Omega = 2\pi \sin \Theta d\Theta$$

Utilizando esta expresión en (4-7), escribiendo $N(\Theta) d\Theta$ como dN y escribiendo el término pt como n , se obtiene

$$dN = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \left(\frac{ZZe^2}{2Mv^2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4(\Theta/2)} I n d\Omega$$

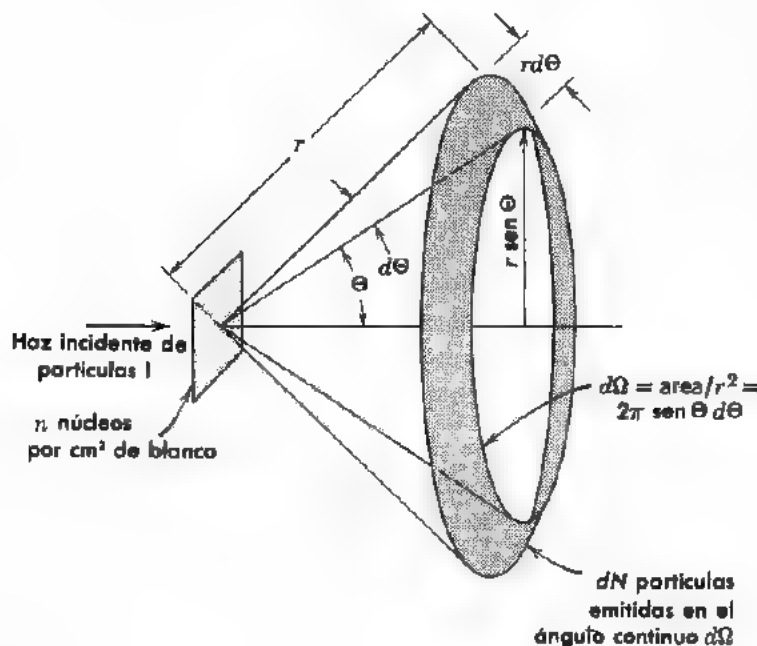


FIGURA 4-8

Ilustración de la definición de sección transversal diferencial $d\sigma/d\Omega$. Si el blanco es lo suficientemente delgado como para que una partícula incidente tenga una oportunidad despreciable de interactuar en más de un núcleo mientras atraviesa el blanco, se tiene $dN = (d\sigma/d\Omega) I n d\Omega$.

Comparando con la definición de (4-8) se demuestra que la *sección transversal diferencial de dispersión de Rutherford* es

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \left(\frac{zZe^2}{2Mv^2}\right)^2 \frac{1}{\sin^4(\Theta/2)} \quad (4-9)$$

4.3 La estabilidad del átomo nuclear

La verificación experimental detallada de las predicciones del modelo del átomo nuclear de Rutherford dio lugar a ciertas dudas en lo concerniente a la validez del modelo. En el centro del átomo se encuentra un núcleo cuya masa es aproximadamente la del átomo completo y cuya carga es igual al número atómico Z multiplicado por e ; alrededor de este núcleo existen Z electrones que hacen que el átomo sea neutro. Pero surgen ciertas preguntas acerca de la *estabilidad* del átomo. Por ejemplo, si se supone que los electrones están estacionarios, no existe un arreglo estable de esos electrones que prevenga que éstos caigan al núcleo bajo la influencia de la atracción de Coulomb. No es posible permitir que el átomo vuelva a caer a lo mismo (regresando al pastel de pasas de tamaño nuclear) debido a que su radio sería del orden de un radio nuclear que es menor en cuatro órdenes de magnitud que el radio que los experimentos han mostrado que tiene el átomo.

Un primer vistazo parece indicar que simplemente deberá permitirse que los electrones circulen alrededor del núcleo en órbitas similares a la de los planetas alrededor del sol. Tal sistema sería mecánicamente estable, como lo es el sistema solar. Sin embargo, surge una seria dificultad al tratar de llevar esta idea del sistema planetario al sistema atómico. El problema es que los electrones cargados estarían constantemente acelerados en su movimiento alrededor del núcleo y, según la teoría electromagnética clásica todo cuerpo cargado acelerado radía energía en forma de radiación electromagnética (véase apéndice B). La energía debería emitirse a expensas de la energía mecánica del electrón y el electrón debería caer en espiral hacia el núcleo. De nuevo se tiene un átomo que vuelve a encajar rápidamente a las dimensiones nucleares (para un átomo de diámetro de 10^{-10} m se puede computar que el tiempo de colapso sería $\simeq 10^{-12}$ seg). De esta manera se debería obtener la emisión de un espectro continuo de radiación lo cual no está de acuerdo con el espectro discreto, que sabemos, emiten los átomos.

Este problema de la estabilidad de los átomos conduce a un modelo simple de la estructura atómica. La clave de este exitoso modelo, propuesto en 1913 por Niels Bohr, fue la predicción del espectro de radiación emitido por ciertos átomos. Por lo que resulta apropiado en este momento describir algunos de los rasgos principales de esos espectros.

4.4 Espectros atómicos

En la figura 4-9 se muestra un aparato típico utilizado en la medida de los espectros atómicos. La fuente consiste en una descarga eléctrica que pasa a través de una región que contiene un gas monoatómico. Debido a colisiones con los electrones y con otros átomos, algunos de los átomos en la descarga quedan en un estado en el que su energía total es mayor que la energía de un átomo normal. Al regresar a su estado de energía normal los átomos liberan su exceso de energía mediante la emisión de radiación electromagnética. Esta radiación se colima mediante una rendija y pasa a través de un prisma (o rejilla de difracción para mejor resolución) donde se rompe en su espectro de longitudes de onda para registrarse posteriormente en una placa fotográfica.

La naturaleza del espectro observado se indica sobre la placa fotográfica. En contraste con el espectro continuo de la radiación electromagnética emitida, por ejemplo por la superficie de sólidos a alta temperatura, *la radiación electromagnética emitida por átomos libres se concentra en*

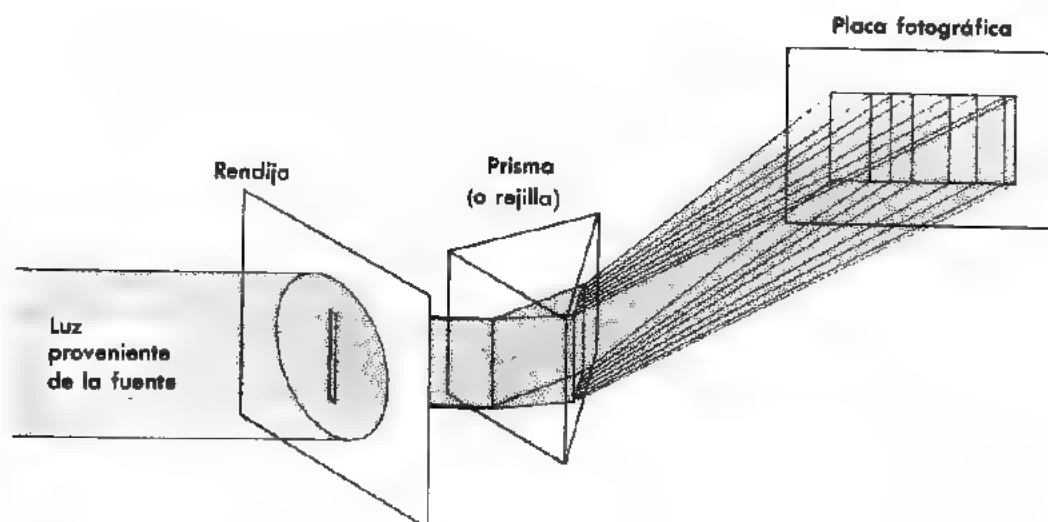


FIGURA 4-9

Representación esquemática de un aparato usado para medir espectros atómicos.

un número de longitudes de onda discretas. A cada una de estas longitudes de onda componente se le denomina una línea debido a que sobre la placa fotográfica cada una de ellas deja una imagen de la rendija. La investigación de los espectros emitidos por diferentes tipos de átomos muestra que cada uno de ellos tiene su propio espectro característico, es decir, las líneas del espectro se encuentran en un conjunto de longitudes de onda característico. Este hecho es de gran importancia práctica debido a que hace de la espectroscopía una técnica muy útil que viene a sumarse a las técnicas usuales del análisis químico. Por esta razón es que se han dedicado muchos esfuerzos para mejorar las medidas de los espectros atómicos y de hecho es necesario mucho esfuerzo debido a que los espectros consisten de muchos cientos de líneas y por lo general son muy complicados.

Sin embargo, el espectro del hidrógeno es relativamente simple, lo cual no es sorprendente ya que éste es el átomo más sencillo debido a que contiene solamente un electrón. La mayor parte del universo consiste de átomos de hidrógeno aislados, de manera que el espectro del hidrógeno es de considerable interés práctico. Como se verá después, existen razones teóricas e históricas para estudiarlo. La figura 4-10 representa la parte del espectro atómico del hidrógeno que cae aproximadamente dentro del intervalo de longitudes de onda visibles. Se ve que el espaciamiento entre líneas adyacentes del espectro, en longitudes de onda, decrece continuamente conforme decrece la longitud de onda de las líneas, de manera que la *serie de líneas* converge a la llamada *límite de la serie* en 3645.6 Å. Las líneas de longitud de onda corta, incluyendo el límite de la serie, son difíciles de observar experimentalmente debido al poco espaciamiento y debido a que se encuentran en el ultravioleta.

La regularidad obvia del espectro de H llevó a muchas gentes a buscar una fórmula empírica que representara la longitud de onda de las líneas. Tal fórmula fue descubierta por Balmer en 1885, y es la ecuación simple

$$\lambda = 3646 \frac{n^2}{n^2 - 4} \quad (\text{en unidades } \text{Å})$$

donde $n=3$ para H_α , $n=4$ para H_β , $n=5$ para H_γ , etc., y que es capaz de predecir las longitudes de onda para las primeras nueve líneas de la serie, que eran todas las que se conocían entonces, con una aproximación mayor que una parte en 1000. Este descubrimiento inició una investigación para fórmulas empíricas similares que pudieran aplicarse a series de líneas que en ocasiones son identificables dentro de la distribución complicada de líneas que constituyen los

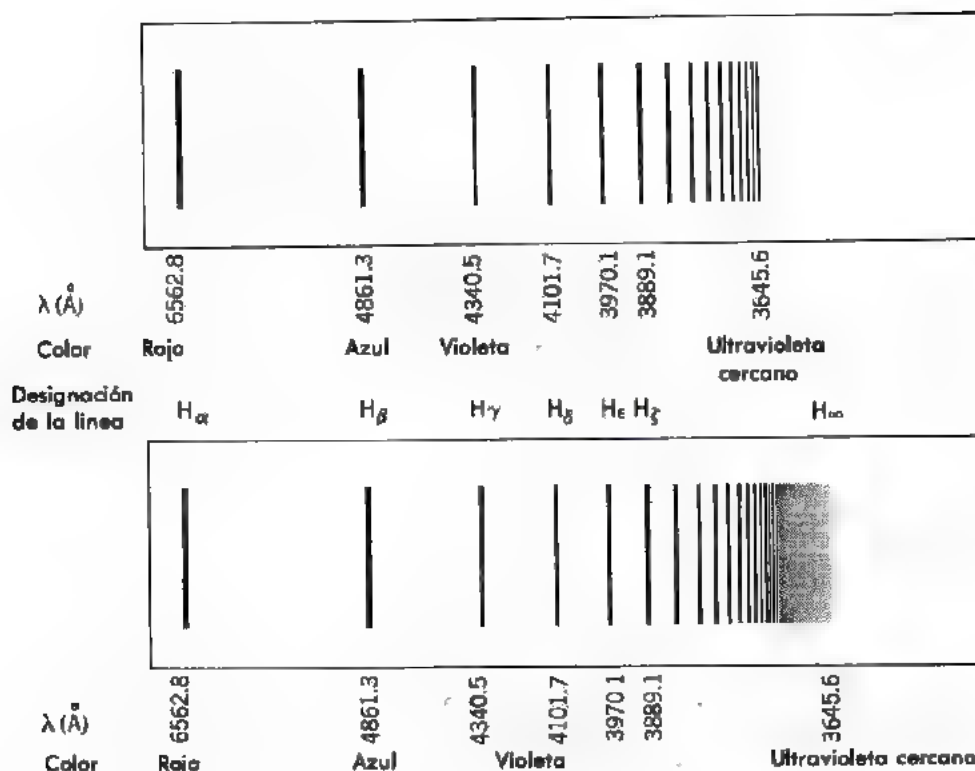


FIGURA 4-10

Arriba: Fotografía de la parte visible del espectro del hidrógeno. Abajo: Esquema del mismo espectro con las líneas denotadas.

espectros de otros elementos. La mayor parte de este trabajo fue realizado por Rydberg alrededor de 1890 quien encontró conveniente trabajar con el recíproco de la longitud de onda de las líneas en vez de la longitud de onda misma. En términos del recíproco de la longitud de onda κ la *fórmula de Balmer* se puede escribir como

$$\kappa = 1/\lambda = R_{\text{H}}(1/2^2 - 1/n^2) \quad n = 3, 4, 5, \dots \quad (4-10)$$

donde R_{H} es la llamada *constante de Rydberg* para el hidrógeno. A partir de datos espectroscópicos recientes, se sabe que su valor es

$$R_{\text{H}} = 10967757.6 \pm 1.2 \text{ m}^{-1}$$

Lo cual indica la precisión posible en las mediciones espectroscópicas.

Se han encontrado fórmulas de este tipo para un número de series. Así por ejemplo, se sabe de la existencia de cinco series de líneas en el espectro del hidrógeno y estas se muestran en la tabla 4-1.

Para átomos de elementos alcalinos (Li, Na, K, . . .) las fórmulas para las series son de la misma estructura general. Esto es

$$\kappa = \frac{1}{\lambda} = R \left[\frac{1}{(m-a)^2} - \frac{1}{(n-b)^2} \right] \quad (4-11)$$

donde R es la constante de Rydberg para el elemento particular, a y b son constantes para la serie particular, m es un entero que es fijo para la serie particular y n es un entero variable. La

constante de Rydberg tiene el mismo valor, dentro de un 0.05%, para todos los elementos aunque muestra un ligero incremento sistemático cuando se incrementa el peso atómico.

Hasta aquí se ha analizado el *espectro de emisión* de un átomo. Una propiedad íntimamente relacionada es el *espectro de absorción*, el cual se puede medir con un aparato similar al mostrado en la figura 4-9 excepto que se utiliza una fuente que emite un espectro continuo y una celda con paredes de vidrio que contiene al gas monoatómico por investigar y que se inserta en algún lugar entre la fuente y el prisma. Después de la exposición y el revelado se encuentra que la placa fotográfica está totalmente oscurecida excepto en cierto número de líneas, las cuales representan un conjunto de longitudes de onda componentes del espectro continuo que incide sobre el prisma que se han perdido y que debieron haber sido absorbidas por los átomos del gas que se encuentra en la celda. Se observa que para cada línea en el espectro de absorción de un elemento existe una línea (de la misma longitud de onda) correspondiente en su espectro de emisión; sin embargo, el inverso no es cierto. Sólo ciertas líneas de emisión se muestran en el espectro de absorción. Normalmente, para el gas hidrógeno sólo aparecen en el espectro de absorción las líneas que corresponden a la serie de Lyman, pero cuando el gas está a alta temperatura, por ejemplo en la superficie de una estrella, las líneas que se encuentran son las correspondientes a la serie de Balmer.

4.5 Postulados de Bohr

Todos estos detalles de los espectros atómicos y muchos más que no se han estudiado deberán de explicarse mediante un modelo adecuado de la estructura atómica. Además, la gran precisión de las medidas espectroscópicas imponen requisitos muy severos a la precisión con la cual este modelo debe de ser capaz de predecir cuantitativamente los detalles de los espectros.

En 1913 Niels Bohr desarrolló un modelo que estaba en acuerdo cuantitativo con ciertos datos espectroscópicos (por ejemplo, el espectro del hidrógeno). Este modelo tenía el atractivo adicional de que las matemáticas relativas a este eran muy fáciles de entender. Aunque probablemente el estudiante ya ha visto algo del modelo de Bohr al estudiar sus cursos de física o química elemental, aquí se considerará en detalle con el fin de obtener varios resultados que se necesitarán para hacer comparaciones dentro de este texto y también para revisar los postulados, a veces confusos, sobre los cuales está basado el modelo. Estos postulados son:

1. *Un electrón en un átomo se mueve en una órbita circular alrededor del núcleo bajo la influencia de la atracción de Coulomb entre el electrón y el núcleo, sujetándose a las leyes de la mecánica clásica.*

TABLA 4-1. La serie del hidrógeno.

Nombres	Intervalos de longitudes de onda	Fórmulas
Lyman	Ultravioleta	$\kappa = R_H \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 2, 3, 4, \dots$
Balmer	Ultravioleta cercano y visible	$\kappa = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 3, 4, 5, \dots$
Paschen	Infrarrojo	$\kappa = R_H \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 4, 5, 6, \dots$
Brackett	Infrarrojo	$\kappa = R_H \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 5, 6, 7, \dots$
Pfund	Infrarrojo	$\kappa = R_H \left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 6, 7, 8, \dots$

2. En lugar de una infinidad de órbitas que serían posibles en la mecánica clásica, para un electrón sólo es posible moverse en una órbita para la cual su impulso angular orbital L es un múltiplo entero de \hbar , la constante de Planck dividida entre 2π .

3. A pesar de que el electrón se acelera constantemente cuando se mueve en una de estas órbitas permitidas, no radia energía electromagnética. Entonces, su energía total E permanece constante.

4. Se emite radiación electromagnética si un electrón, que inicialmente se mueve en una órbita de energía total E_i , cambia su movimiento de manera discontinua para moverse en una órbita de energía total E_f . La frecuencia de la radiación emitida es igual a la cantidad $(E_i - E_f)$ dividida entre la constante h de Planck.

El primer postulado hace que el modelo de Bohr tome como base la existencia del núcleo atómico. El segundo postulado introduce la cuantización. Sin embargo, obsérvese la diferencia entre la cuantización de Bohr del impulso angular orbital de un electrón que se mueve bajo la influencia de una fuerza inversa del cuadrado (Coulomb)

$$L = n\hbar \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4-12)$$

y la cuantización de Planck de la energía de una partícula, tal como un electrón, que efectúa movimiento armónico simple bajo la influencia de una fuerza restauradora armónica; $E = nh\nu$, $n = 0, 1, 2, \dots$. En la siguiente sección se verá que la cuantización del impulso angular orbital del electrón atómico conduce a la cuantización de su energía total pero con una ecuación de cuantización de la energía diferente de la ecuación de Planck. El tercer postulado resuelve el problema de la estabilidad de un electrón que se mueve en una órbita circular, planteado por la emisión de radiación electromagnética del electrón según la teoría clásica, postulando simplemente que este hecho particular de la teoría clásica no es válido para el caso de un electrón atómico. El postulado se basó en el hecho de que experimentalmente se ha observado que los átomos son estables aun cuando se contradiga a la teoría clásica. El cuarto postulado

$$\nu = \frac{E_i - E_f}{h} \quad (4-13)$$

es realmente el postulado de Einstein referente a que la frecuencia de un fotón de radiación electromagnética es igual a la energía del fotón dividida entre la constante de Planck.

Estos postulados resumen un trabajo esmerado para mezclar la física clásica y la no clásica. Se supone que el electrón moviéndose en una órbita circular obedece a la mecánica clásica y al mismo tiempo se incluye la idea no clásica de cuantización de impulso angular orbital. Se supone que el electrón obedece un hecho de la teoría electromagnética clásica (ley de Coulomb), a la vez que no satisface otro hecho (la emisión de radiación por cuerpos acelerados). Sin embargo, no es sorprendente el que las leyes de la física clásica, que están basadas en la experiencia con sistemas macroscópicos, no sean completamente válidas cuando se trabaja con sistemas microscópicos como lo es el átomo.

4.6 Modelo de Bohr

La justificación de los postulados de Bohr, o de cualquier conjunto de postulados, solamente se puede encontrar comparando las predicciones que derivan de ellos con los resultados experimentales. En esta sección se derivarán algunas de estas predicciones y se compararán con los datos de la sección 4-4.

Considérese un átomo que consiste de un núcleo de carga $+Ze$ y masa M y un solo electrón de carga $-e$ y masa m . Para un átomo de hidrógeno neutro $Z = 1$, para un átomo de helio simplemente ionizado $Z = 2$, para un átomo de litio doblemente ionizado $Z = 3$, etc. Supóngase que el electrón se mueve en una órbita circular alrededor del núcleo. Inicialmente se supone que la masa del electrón es completamente despreciable comparada con la masa del núcleo y

consecuentemente se asume que el núcleo permanece fijo en el espacio. La condición de estabilidad mecánica del electrón es

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2} = m \frac{v^2}{r} \quad (4-14)$$

donde v es la velocidad del electrón en su órbita, y r es el radio de ésta. El primer miembro de esta ecuación es la fuerza de Coulomb que actúa sobre el electrón y el segundo miembro es ma donde a es la aceleración centrípeta que mantiene al electrón en su órbita circular. Ahora, el impulso angular orbital del electrón, $L = mvr$, deberá ser una constante, ya que la fuerza que actúa sobre el electrón está por entero en la dirección radial. Aplicando la condición de cuantización, (4-12) a L , se obtiene

$$mvr = n\hbar \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4-15)$$

Resolviendo para v y substituyendo en (4-14), se obtiene

$$Ze^2 = 4\pi\epsilon_0 mv^2 r = 4\pi\epsilon_0 mr \left(\frac{n\hbar}{mr} \right)^2 = 4\pi\epsilon_0 \frac{n^2 \hbar^2}{mr}$$

así

$$r = 4\pi\epsilon_0 \frac{n^2 \hbar^2}{mZe^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4-16)$$

$$v = \frac{n\hbar}{mr} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{n\hbar} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4-17)$$

La aplicación de la condición de cuantización del impulso angular ha restringido las órbitas circulares posibles a aquellas cuyos radios están dados por (4-16). Obsérvese que estos radios son proporcionales al cuadrado del número cuántico n . Se evalúa el radio de la órbita más pequeña ($n = 1$) para un átomo de hidrógeno ($Z = 1$) poniendo los valores conocidos de \hbar , m , y e , se obtiene $r = 5.3 \times 10^{-11} \text{ m} \approx 0.5 \text{ \AA}$. Posteriormente se verá que el electrón tiene su energía total mínima cuando se encuentra en la órbita correspondiente a $n = 1$. Consecuentemente el radio de esta órbita se podrá interpretar como una medida del radio de un átomo de hidrógeno en su estado normal, lo cual se ajusta muy bien con la estimación, mencionada previamente, de que el orden de magnitud de un radio atómico es 1 \AA . Por lo tanto, los postulados de Bohr predicen un tamaño razonable para el átomo. Evaluando la velocidad orbital de un electrón en la órbita más pequeña de un átomo de hidrógeno con ayuda de la ecuación (4-17), se obtiene $v = 2.2 \times 10^6 \text{ m/seg}$. De la ecuación se puede ver que esta es la velocidad máxima posible para un electrón en un átomo de hidrógeno. El hecho de que esta velocidad sea menor que el 1% de la velocidad de la luz es la justificación para utilizar en el modelo de Bohr la mecánica clásica en vez de la mecánica relativista. Por otra parte, la ecuación (4-17) muestra que para valores grandes de Z la velocidad del electrón se hace relativista y en estos casos no es posible aplicar el modelo. Esta ecuación también muestra el por qué en el modelo de Bohr no está permitido que el número cuántico n tome el valor $n = 0$, como ocurre en la ecuación de cuantización de Planck.

En seguida calculando la energía total de un electrón atómico que se mueve en una de las órbitas permitidas. Definiendo el cero de la energía potencial cuando el electrón se encuentra a una distancia infinita desde el núcleo. Entonces la energía potencial V para cualquier distancia finita r se puede obtener integrando el trabajo que hará la fuerza de Coulomb actuando desde r hasta ∞ . Entonces

$$V = - \int_r^{\infty} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} dr = - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

La energía potencial es negativa debido a que la fuerza de Coulomb es atractiva y se requiere hacer trabajo para mover al electrón desde r hasta el infinito en contra de esta fuerza. Con la ayuda de (4-14) se puede evaluar la energía cinética del electrón

$$K = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 2r}$$

Entonces, la energía total E del electrón es

$$E = K + V = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 2r} = -K$$

Utilizando (4-16) para r en la ecuación anterior, se tiene

$$E = -\frac{mZ^2e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4-18)$$

Obsérvese que la cuantización del impulso angular orbital del electrón conduce a una cuantización de su energía total.

La información contenida en la ecuación (4-18) mediante un diagrama de niveles de energía se presenta en la figura 4-11. A la izquierda se muestra la energía de cada nivel expresada en Joules y electron-volts y en el segundo miembro se muestra el número cuántico del nivel. El diagrama está construido de tal manera que la distancia de cualquier nivel al nivel de energía cero es proporcional a la energía del nivel en cuestión. Obsérvese que el menor valor permitido (el más negativo) de la energía total, ocurre para el número cuántico más pequeño $n = 1$ y que conforme n aumenta la energía total del estado cuántico se hace menos negativa, con E aproximándose a cero conforme n se aproxima a infinito. Ya que el estado de menor energía total es, por supuesto, el estado más estable para el electrón, se ve que el estado normal del electrón en un átomo monoeléctrico es el estado para el cual $n = 1$.

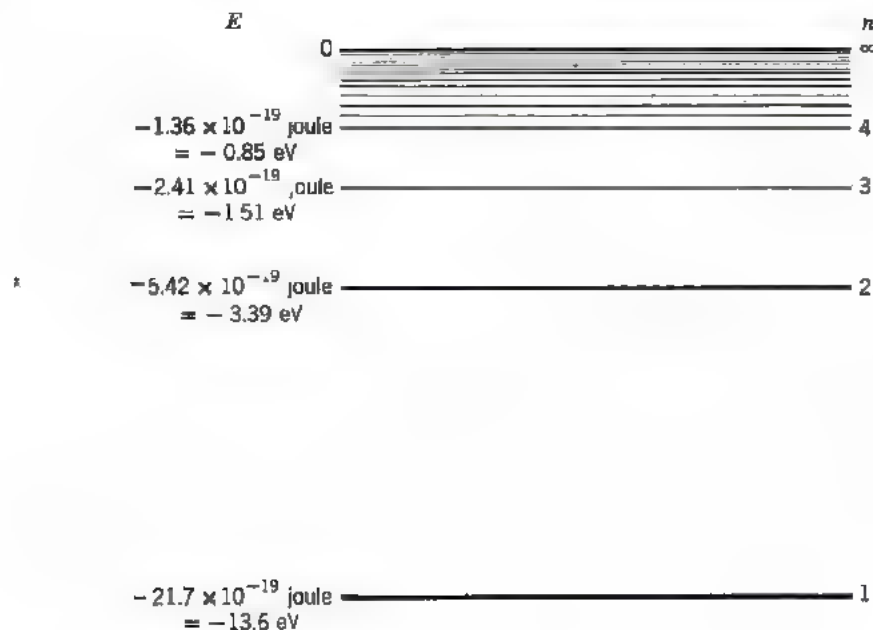


FIGURA 4-11

Diagrama de niveles de energía para el átomo de hidrógeno.

Ejemplo 4-6. Calcular a partir de (4-18) la energía de enlace del átomo de hidrógeno (la energía que liga al electrón con el núcleo).

La energía de enlace es numéricamente igual a la energía del estado más bajo en la figura (4-11), que corresponde a $n = 1$ en (4-18). Con $Z = 1$, esto produce

$$\begin{aligned} E &= -\left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{me^4}{2\hbar^2} \\ &= -\frac{(9.0 \times 10^9 \text{ nt-m}^2/\text{coul}^2)^2 \times 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg} \times (1.60 \times 10^{-19} \text{ coul})^4}{2 \times (1.05 \times 10^{-34} \text{ joule-sec})^2} \\ &= -2.17 \times 10^{-18} \text{ joule} = -13.6 \text{ eV} \end{aligned}$$

lo cual concuerda muy bien con la energía de enlace observada experimentalmente para el hidrógeno. ◀

A continuación se calculará la frecuencia ν de la radiación electromagnética emitida cuando el electrón sufre una transición del estado cuántico n_i al estado cuántico n_f ; esto es, cuando un electrón que se mueve inicialmente en una órbita caracterizada por el número cuántico n_i cambia su movimiento de manera discontinua hasta moverse en una órbita caracterizada por el número cuántico n_f . Utilizando el cuarto postulado de Bohr (4-13) y (4-18) se tiene

$$\nu = \frac{E_i - E_f}{h} = +\left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{mZ^2e^4}{4\pi\hbar^3} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$$

En términos del recíproco de la longitud de onda $\kappa = 1/\lambda = \nu/c$,

$$\kappa = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{me^4}{4\pi\hbar^3c} Z^2 \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$$

o

$$\kappa = R_\infty Z^2 \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right) \quad \text{donde } R_\infty \equiv \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{me^4}{4\pi\hbar^3c} \quad (4-19)$$

donde n_i y n_f son enteros.

Las predicciones esenciales del modelo de Bohr están contenidas en (4-18) y (4-19). Primero se analizará la emisión de radiación electromagnética por un átomo de Bohr monoeléctrico en términos de estas ecuaciones.

1. El estado normal del átomo será el estado en el cual el electrón tiene la energía más baja, es decir, el estado $n = 1$. A este se le llama el *estado base*. (Estado base significa estado fundamental, el término proviene del vocablo alemán *grund* que significa fundamental).

2. En una descarga eléctrica o en algún otro proceso, el átomo recibe energía debido a las colisiones, etc. Esto significa que el electrón deberá sufrir una transición a un estado de mayor energía o *estado excitado*, en el cual $n > 1$.

3. Obedeciendo la tendencia común de todos los sistemas físicos, el átomo emitirá su exceso de energía y regresará al estado base. Esto es acompañado por una serie de transiciones en las cuales el electrón cae sucesivamente a estados excitados de menor energía hasta que finalmente alcanza el estado base. En cada transición se emite radiación electromagnética con una longitud de onda que depende de la energía permitida para el electrón, es decir, de los números cuánticos inicial y final. En un caso típico, el electrón se excitaría hasta un estado $n = 7$ y caería sucesivamente a través de los estados $n = 4$ y $n = 2$ hasta el estado base $n = 1$. De acuerdo con (4-19) se emitirían tres líneas del espectro atómico con los recíprocos de longitud de onda correspondientes a $n_i = 7$ y $n_f = 4$, $n_i = 4$ y $n_f = 2$, y $n_i = 2$ y $n_f = 1$.

4. Durante el proceso de medición de un espectro atómico, tiene lugar un número muy grande de excitaciones y desexcitaciones, de manera que se emite el espectro completo y ocurren todas las transiciones posibles. La ecuación (4-19) proporciona todas las longitudes de onda o recíprocos de éstas de las líneas que constituyen el espectro. En esa expresión se permite que tanto n_i como n_f tomen todos los valores enteros posibles con la única restricción que $n_i > n_f$. Para el hidrógeno ($Z = 1$) considérese el subconjunto de líneas espectrales que provienen de las transiciones en las cuales $n_f = 2$. Según (4-19), los recíprocos de las longitudes de onda de estas líneas están dados por

$$\kappa = R_{\infty}(1/n_f^2 - 1/n_i^2) \quad n_f = 2 \text{ y } n_i > n_f$$

o

$$\kappa = R_{\infty}(1/2^2 - 1/n^2) \quad n = 3, 4, 5, 6, \dots$$

Que es idéntica a la fórmula para la serie de Balmer del espectro del hidrógeno(4-10), si R_{∞} es igual a R_H . De acuerdo con el modelo de Bohr:

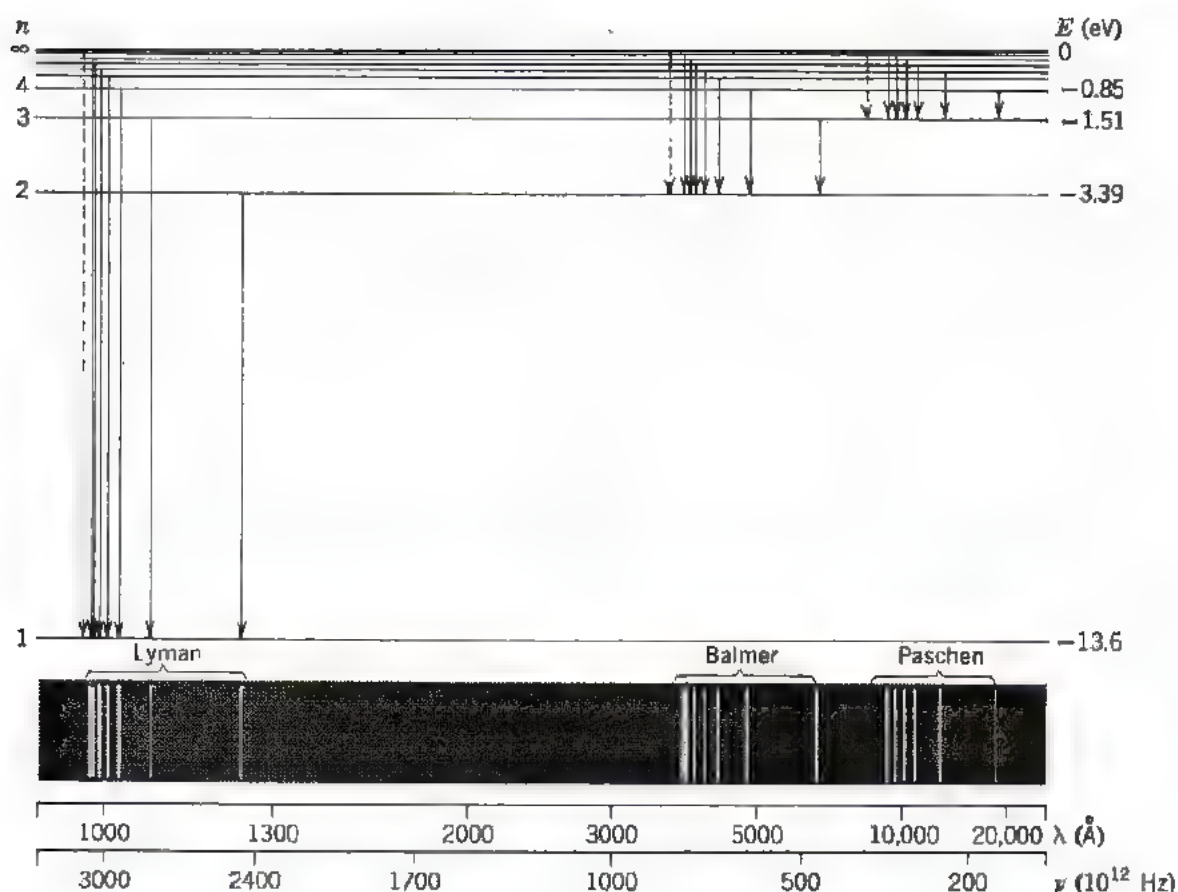
$$R_{\infty} = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{me^4}{4\pi\hbar^3c}$$

A pesar de que los valores numéricos de algunas de las cantidades que intervienen en esta ecuación no se conocían con suficiente precisión en su tiempo, Bohr evaluó R_{∞} en términos de estas cantidades y encontró que el valor resultante concordaba muy bien con el valor experimental de R_H . En la siguiente sección se hará una comparación detallada, utilizando datos recientes, entre el valor experimental de R_H y la predicción de Bohr y se mostrará que ambos concuerdan casi perfectamente.

Según el modelo de Bohr, cada una de las cinco series conocidas para el espectro del hidrógeno proviene de un subconjunto de transiciones en las cuales el electrón llega a cierto estado cuántico final n_f . Para la serie de Lyman $n_f = 1$; para la de Balmer $n_f = 2$, para la de Paschen $n_f = 3$, para la de Brackett $n_f = 4$ y para la de Pfund $n_f = 5$. De estas series, las tres primeras se muestran de manera muy conveniente en el diagrama de niveles de energía de la figura 4-12. La transición que da lugar a una línea particular de una serie se indica en este diagrama mediante una flecha que va del estado cuántico inicial n_i al estado cuántico final n_f . Solamente se muestran las flechas que corresponden a las primeras líneas de cada serie y al límite de la misma. Puesto que la distancia entre dos niveles de energía cualesquiera es proporcional a la diferencia de energía entre estos dos niveles y en vista de que (4-13) establece que la frecuencia ν (o el recíproco de la longitud de onda) es proporcional a la diferencia de energía, la longitud de cualquiera de las flechas es proporcional a la frecuencia (o recíproco de la longitud de onda) de la línea espectral correspondiente.

Las longitudes de onda de las líneas de todas estas series se satisfacen en forma muy adecuada por (4-19) utilizando el valor de n_f apropiado. Este fue un gran triunfo del modelo de Bohr. El éxito del modelo fue particularmente impresionante debido a que cuando fue desarrollado el modelo por Bohr no habían sido descubiertas las series de Lyman, Brackett y Pfund. La existencia de estas series fue predicha y rápidamente encontradas en el experimento por las personas a quienes deben su nombre.

El modelo trabaja igualmente bien cuando se lo aplica al caso de átomos monoeléctricos con $Z = 2$, es decir, átomos de helio simplemente ionizados He^+ . Estos átomos se pueden producir haciendo pasar una descarga eléctrica violenta (una chispa) a través de helio gas. Esto se manifiesta por la emisión de un espectro más simple que el emitido por los átomos de helio normales. En efecto, el espectro atómico del He^+ es exactamente el mismo que el espectro del hidrógeno con la excepción de que los recíprocos de las longitudes de onda de todas las líneas son casi exactamente cuatro veces mayores; lo cual se explica muy fácilmente en términos del modelo de Bohr haciendo en (4-19) $Z^2 = 4$.

**FIGURA 4-12**

Arriba: Diagrama de niveles de energía para el hidrógeno con el número cuántico n para cada nivel y algunas de las transiciones que aparecen en el espectro. Entre los niveles marcados $n=4$ y $n=\infty$ hay una infinidad de niveles. *Abajo:* Líneas espectrales correspondientes a las tres series indicadas. Dentro de cada serie, las líneas espectrales observan un patrón regular, aproximándose el límite de la serie al extremo de longitudes de onda corta. Tal como se ha dibujado aquí, ni la escala de la longitud de onda ni la de la frecuencia es lineal, habiéndose escogido simplemente para dar claridad a la ilustración. Una escala lineal para la longitud de onda representaría más fielmente el aspecto real de la placa fotográfica que se obtendría de un espectroscopio. Las series de Brackett y Pfund, que no se muestran, están en la parte del infrarrojo lejano del espectro.

En términos del modelo de Bohr también resulta fácil entender las propiedades del espectro de absorción de los átomos monoeléctricos. Puesto que el electrón en el átomo deberá tener una energía total exactamente igual a la energía de uno de los estados de energía permitida, el átomo puede absorber solamente cantidades discretas de energía proveniente de la radiación electromagnética incidente. Este hecho conduce a la idea de considerar a la radiación incidente como un haz de fotones y que solamente aquellos cuya frecuencia está dada por $E = h\nu$, donde E es una de las cantidades discretas de energía, pueden ser absorbidos por el átomo. Entonces el proceso de absorber radiación electromagnética es justamente el inverso del proceso de emisión normal y las líneas del espectro de absorción tendrán exactamente las mismas longitudes de onda que las líneas del espectro de emisión. Por lo general el átomo siempre está inicialmente en el estado base $n=1$ de manera que solamente puede ocurrir el proceso de absorción de $n=1$ a $n > 1$. Por lo tanto solo se observarán normalmente las líneas de absorción que corresponden a la serie de Lyman (para el hidrógeno). Sin embargo, si el gas que contiene a los átomos absorbentes se encuentra a gran temperatura, entonces, debido a las condiciones algunos de los

átomos se encontrarán inicialmente en el primer estado excitado $n=2$ y se observarán las líneas de absorción correspondientes a la serie de Balmer.

Ejemplo 4-7. Estimar la temperatura de un gas que contiene átomos de hidrógeno y para el cual se observa en el espectro de absorción la serie de Balmer.

La distribución de probabilidad de Boltzmann (véase apéndice C) demuestra que la relación del número n_2 de átomos en el primer estado excitado al número n_1 de átomos en el estado base, para una muestra grande en equilibrio a temperatura T , es

$$\frac{n_2}{n_1} = \frac{e^{-E_2/kT}}{e^{-E_1/kT}}$$

donde k es la constante de Boltzmann, $k = 1.38 \times 10^{-23}$ joule/ $^{\circ}\text{K} = 8.62 \times 10^{-5}$ eV/ $^{\circ}\text{K}$. Para átomos de hidrógeno las energías de estos dos estados están dadas en el diagrama de niveles de energía de la figura 4-11: $E_1 = -13.6$ eV, $E_2 = -3.39$ eV. Entonces

$$\frac{n_2}{n_1} = e^{-(-3.39+13.6) \text{ eV}/(8.62 \times 10^{-5} \text{ eV}/^{\circ}\text{K})T} = e^{-1.18 \times 10^5 \text{ } ^{\circ}\text{K}/T}$$

En consecuencia, solamente existirá inicialmente en el primer estado excitado una fracción significativa de los átomos de hidrógeno si T es del orden de o mayor que 10^5 $^{\circ}\text{K}$; y solamente podrán producir líneas de absorción de la serie de Balmer cuando absorbe energía estando en ese nivel.

En realidad, se observan líneas de absorción en el hidrógeno gaseoso de algunas atmósferas estelares: lo cual proporciona una forma para estimar la temperatura de la superficie de una estrella. ◀

4.7 Corrección por masa nuclear finita

En la sección anterior se supuso que la masa del núcleo atómico era infinitamente grande comparada con la masa de los electrones del átomo, de manera que el núcleo permanecía fijo en el espacio. Esta es una buena aproximación aun para el hidrógeno que contiene al núcleo más ligero, ya que la masa de este núcleo es aproximadamente 2000 veces mayor que la masa del electrón. Sin embargo, los datos espectroscópicos son tan precisos, que antes de que se haga una comparación numérica detallada de estos datos con el modelo de Bohr se deberá tomar en cuenta el hecho de que la masa nuclear en realidad es finita. En tal caso tanto el electrón como el núcleo se moverán alrededor de su centro de masas común. Sin embargo, no es difícil demostrar que en ese sistema planetario el electrón se mueve en relación al núcleo como si el núcleo estuviera fijo y la masa m del electrón estuviera reducida ligeramente al valor μ , que es la *masa reducida* del sistema. Las ecuaciones del movimiento del sistema son las mismas que las que se consideraría si simplemente se substituye μ por m , donde

$$\mu = \frac{mM}{m + M} \quad (4-20)$$

es menor que m por un factor $1/(1 + m/M)$ y M es la masa del núcleo.

Para manejar esta situación Bohr modificó su segundo postulado para exigir que el *impulso angular orbital total del átomo*, L , fuera un múltiplo entero de la constante de Planck dividido entre 2π . Lo cual se logra generalizando (4-15) a

$$\mu vr = n\hbar \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4-21)$$

Usando μ en vez de m en esta ecuación, se toma en cuenta tanto el impulso angular del núcleo como el del electrón. Haciendo modificaciones similares al resto de la derivación de Bohr para el caso de masa nuclear finita, se encuentra que todas las ecuaciones son idénticas a las obtenidas

con anterioridad excepto que la masa del electrón m se ha substituido por la masa reducida μ . En particular, la fórmula para los recíprocos de las longitudes de onda de las líneas espectrales resulta

$$\kappa = R_M Z^2 \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \quad \text{donde } R_M \equiv \frac{M}{m+M} R_\infty \equiv \frac{\mu}{m} R_\infty \quad (4-22)$$

La cantidad R_M es la constante de Rydberg para un núcleo de masa M . Conforme $M/m \rightarrow \infty$, resulta que $R_M \rightarrow R_\infty$, que es la constante de Rydberg para un núcleo infinitamente pesado. En general, la constante de Rydberg R_M es menor que R_∞ por el factor $1/(1+m/M)$. Para el caso más extremo que es el de hidrógeno, $M/m = 1836$ y R_M es menor que R_∞ por aproximadamente una parte en 2000.

Si de (4-22) se evalúa R_H utilizando los valores aceptados comunmente para las cantidades m , M , e , c y h , se encuentra $R_H = 10968100 \text{ m}^{-1}$. Comparando este valor con el valor experimental de R_H dado en la sección 4-4 se vé que el modelo de Bohr corregido por masa nuclear finita concuerda con los datos espectroscópicos en ¡tres partes en 100,000!

Ejemplo 4-8. En el capítulo 2 se habló del "átomo" *positronio* que consiste de un positrón y un electrón que se mueven alrededor de su centro de masas, el cual se encuentra equidistante de ambos.

(a) Si tal sistema fuera un átomo normal, ¿Cómo sería su espectro de emisión comparado con el del átomo de hidrógeno?

En este caso la masa "nuclear" M es la del positrón, que es igual a m , la masa del electrón. Por lo tanto la masa reducida (4-20) es

$$\mu = \frac{mM}{m+M} = \frac{m^2}{2m} = \frac{m}{2}$$

De acuerdo con (4-22) la constante de Rydberg correspondiente R_M es

$$R_M = \frac{m}{m+m} R_\infty = \frac{R_\infty}{2}$$

Los estados de energía del átomo positronio entonces estarán dados por

$$E_{\text{positronio}} = -\frac{R_M h c Z^2}{n^2} = -\frac{R_\infty h c Z^2}{2n^2}$$

los recíprocos de las longitudes de onda de las líneas espectrales emitidas serán

$$\kappa = \frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c} = \frac{R_\infty}{2} Z^2 \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

Las frecuencias de las líneas emitidas deberán ser entonces la mitad y las longitudes de onda el doble de las del átomo de hidrógeno (con un núcleo infinitamente pesado), siendo Z igual a uno, tanto para el positronio como para el hidrógeno.

(b) ¿Cuál sería el radio de la órbita para el estado base del positronio?

Simplemente se reemplaza m por $\mu = m/2$ en (4.16) y se encuentra

$$r_{\text{positronio}} = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{\mu Z e^2} = 2 \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m Z e^2} = 2r_{\text{hidrógeno}}$$

Por lo tanto, para cualquier estado cuántico n el radio del electrón relativo al "núcleo" es dos veces mayor en el átomo positronio que en el átomo de hidrógeno (con núcleo infinitamente pesado). ◀

Ejemplo 4-9. Un átomo *muónico* contiene un núcleo de carga Ze y un *muón* negativo, μ^- , que se mueve alrededor de él. El μ^- es una partícula elemental con carga $-e$ y una masa que es 207 veces mayor

que la masa de un electrón. Tal átomo se forma cuando un protón, o algún otro núcleo, captura un μ^- .

(a) Calcular el radio de la primera órbita de Bohr para un átomo muónico con $Z = 1$.

La masa reducida del sistema, con $m_{\mu^-} = 207m_e$ y $M = 1836m_e$, es, de (4-20)

$$\mu = \frac{207m_e \times 1836m_e}{207m_e + 1836m_e} = 186m_e$$

Entonces, de (4-16) con $n = 1$, $Z = 1$, y $m = 186m_e$, se obtiene

$$r_1 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{186m_e e^2} = \frac{1}{186} \times 5.3 \times 10^{-11} \text{ m} = 2.8 \times 10^{-13} \text{ m} = 2.8 \times 10^{-3} \text{ Å}$$

Por lo tanto el μ^- está más cerca de la superficie del núcleo (protón) de lo que está el electrón en el átomo de hidrógeno. Este es el hecho que hace interesantes a los átomos muónicos, cuyo estudio proporciona información acerca de las propiedades nucleares.

(b) Calcular la energía de enlace de un átomo muónico con $Z = 1$. De (4-18) con $Z = 1$, $n = 1$, y $m = \mu = 186m_e$, se tiene

$$E = -186 \frac{m_e e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2} = -186 \times 13.6 \text{ eV} = -2530 \text{ eV}$$

para la energía del estado base. En consecuencia la energía de enlace es 2530 eV.

(c) ¿Cuál es la longitud de onda de la primera línea de la serie de Lyman para este átomo? De (3-22) con $Z = 1$ se tiene

$$\kappa = R_M \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

Para la primera línea de Lyman, $n_i = 2$ y $n_f = 1$. En este caso, $R_M = (\mu/m_e)R_\infty = 186R_\infty$. Por lo tanto

$$\kappa = \frac{1}{\lambda} = 186R_\infty \left(1 - \frac{1}{4} \right) = 139.5R_\infty$$

Con $R_\infty = 109737 \text{ cm}^{-1}$ se obtiene

$$\lambda \approx 6.5 \text{ Å}$$

de modo que las líneas de Lyman se encuentran en la región de los rayos X y por lo tanto se necesitan técnicas de rayos X para estudiar el espectro de los átomos muónicos. ◀

Ejemplo 4-10. El hidrógeno ordinario contiene aproximadamente una parte en 6000 de *deuterio* o hidrógeno pesado. Este es un átomo de hidrógeno cuyo núcleo contiene un protón y un neutrón. ¿Cómo afectará al espectro atómico esta masa nuclear doble?

El espectro sería idéntico si no fuera por la corrección por masa nuclear finita. Para un átomo de hidrógeno normal

$$R_H = R_\infty \frac{\mu}{m} = \frac{R_\infty}{\left(1 + \frac{m}{M}\right)} = \frac{109737 \text{ cm}^{-1}}{\left(1 + \frac{1}{1836}\right)} = 109678 \text{ cm}^{-1}$$

Para un átomo de hidrógeno pesado o deuterio

$$R_D = R_\infty \frac{\mu}{m} = \frac{R_\infty}{\left(1 + \frac{m}{M}\right)} = \frac{109737 \text{ cm}^{-1}}{\left(1 + \frac{1}{2 \times 1836}\right)} = 109707 \text{ cm}^{-1}$$

PREGUNTAS

1. En una colisión entre una partícula α y un electrón, ¿qué consideración general es la que limita la transferencia de impulso? ¿El hecho de que la fuerza sea de Coulomb juega algún papel a este respecto?
2. ¿En qué difiere el modelo del átomo de Thomson de una distribución caótica de protones y electrones en una región esférica?
3. Hacer una lista de las objeciones al modelo de Thomson del átomo.
4. ¿Por qué se especificó que la laminilla es delgada en los experimentos tendientes a comprobar la fórmula de dispersión de Rutherford?
5. La dispersión de partículas α a ángulos muy pequeños no concuerda con la fórmula de Rutherford para esos ángulos. Explique.
6. ¿En qué difiere la deducción de (4-3), que da la trayectoria de una partícula que se mueve bajo la influencia de una fuerza de Coulomb repulsiva de la deducción de la trayectoria de un planeta que se mueve bajo la influencia del campo gravitacional del sol?
7. ¿Podría utilizarse una sección transversal diferencial de dispersión, definida como en (4-8), para describir la dispersión de partículas α a ángulos muy pequeños?
8. ¿Bohr postuló la cuantización de la energía? ¿Qué fue lo que postuló?
9. Para las órbitas del átomo de hidrógeno de Bohr la energía potencial es negativa y de magnitud mayor que la energía cinética. ¿Qué implica esto?
10. Si sólo se necesitara calcular líneas en el espectro de absorción del hidrógeno, ¿Cómo modificaría (4-19) para obtenerlas?
11. Al emitir un fotón, el átomo de hidrógeno, retrocede para conservar el impulso. Explicar el hecho de que la energía del fotón emitido es menor que la diferencia de energías entre los niveles involucrados en el proceso de emisión.
12. ¿Es posible que un átomo de hidrógeno absorba un fotón cuya energía exceda su energía de enlace, 13.6 eV?
13. ¿Es posible obtener un espectro de emisión continuo de un átomo de hidrógeno?
14. ¿Cuál es la energía mínima que debe tener un fotón para iniciar el efecto fotoeléctrico en hidrógeno gas? (¡Cuidado!).
15. ¿Esperaría Ud. observar todas las líneas del hidrógeno atómico si ese gas fuera excitado por electrones de energía 13.6 eV?
16. Suponga que la aniquilación electrón-positrón tiene lugar en el estado base del positronio. ¿Cómo afectará esto las energías de los rayos del decaimiento bifotónico calculado en el capítulo 2, despreciando el sistema ligado?
17. ¿La energía de ionización del deuterio es diferente de la del hidrógeno? Explique.
18. ¿Por qué no está definida la estructura de la gráfica corriente contra el voltaje, en el experimento de Franck-Hertz, figura 4-14?
19. El pico de la figura 4-14 está justamente debajo de 10 eV. ¿Debido a dos excitaciones consecutivas del primer estado excitado del mercurio o a una excitación del segundo estado excitado?

20. ¿En qué otros ejemplos de la física clásica, aparte del movimiento planetario, se presenta la degeneración?
21. La constante de estructura fina α es adimensional y relaciona e , \hbar y c , tres de las constantes fundamentales de la física. ¿Existe alguna otra combinación de estas tres constantes que sea adimensional? (Por supuesto, otras potencias diferentes a las que aparecen en la combinación).
22. ¿Cómo podría aplicarse el principio de correspondencia al diagrama fase de un oscilador lineal, figura 4-16?
23. Según la mecánica clásica, un electrón en un átomo debería ser capaz de moverse con un impulso angular cualesquiera. Según la teoría de Bohr del átomo de hidrógeno, el impulso angular está cuantizado a $L = n\hbar/2\pi$. ¿El principio de correspondencia puede reconciliar estas dos afirmaciones?

PROBLEMAS

1. Demostrar, para un átomo de Thomson que un electrón moviéndose en una órbita circular estable gira con la misma frecuencia a la cual oscilaría en una oscilación a lo largo de un diámetro.
2. ¿Qué radio debería tener un átomo monoelectrónico en el modelo de Thomson si éste irradiara una línea espectral de longitud de onda $\lambda = 6000 \text{ \AA}$? Comente sus resultados.
3. (a) Una partícula α con velocidad inicial v choca con un electrón libre en reposo. Suponiendo que la masa de la partícula es alrededor de 7400 masas electrónicas, demostrar que la máxima deflexión de la partícula α es aproximadamente 10^{-4} rad . (b) Demostrar que la máxima deflexión de una partícula α que interacciona con la carga positiva de un átomo de Thomson de radio 1.0 \AA también es aproximadamente 10^{-4} rad . De esto, argumente que $\theta \ll 10^{-4} \text{ rad}$ para la dispersión de una partícula α por un átomo de Thomson.
4. Derivar (4-5) que relaciona la distancia de máximo acercamiento y el parámetro de impacto con el ángulo de dispersión.
5. Una partícula α de 5.30 MeV es dispersada 60° al pasar por una laminilla delgada de oro. Calcular (a) la distancia de máximo acercamiento D para una colisión frontal y (b) el parámetro de impacto b correspondiente a un ángulo de dispersión de 60° .
6. ¿Cuál es la distancia de máximo acercamiento a un núcleo de cobre para una partícula α de 5.30 MeV en una colisión frontal?
7. Demostrar que el número de partículas α dispersadas por un ángulo Θ o mayor en una dispersión de Rutherford es

$$\left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \pi I \rho t \left(\frac{zZe^2}{Mv^2}\right)^2 \cot^2(\Theta/2)$$

8. La fracción de protones de 6.0 MeV dispersados del haz incidente en una región donde el ángulo de dispersión excede los 60° es igual a 2.0×10^{-5} . El material dispersor es una laminilla de oro delgada con densidad 19.3 g/cm^3 . Calcular el espesor de la hoja de oro utilizando los resultados del problema anterior.
9. Un haz de partículas α de energía cinética 5.30 MeV e intensidad 10^4 partículas/seg inciden normalmente sobre una laminilla de oro de densidad 19.3 g/cm^3 , 197 de peso atómico y espesor $1.0 \times 10^{-5} \text{ cm}$. A una distancia de 10 cm de la hoja se coloca un contador de partículas α de área de 1.0 cm^2 . Utilizando la sección transversal diferencial de dispersión de Rutherford (4-9), encontrar el número de conteos por hora para $\Theta = 10^\circ$ y $\Theta = 45^\circ$, donde Θ es el ángulo entre el haz incidente y una línea que va del centro de la laminilla al centro del contador. El número atómico del oro es 79 .
10. En las mismas condiciones descritas en el problema anterior, se substituye la laminilla de oro por una de cobre de densidad 8.9 g/cm^3 , peso atómico 63.6 y espesor 1.0×10^{-5} . Cuando $\Theta = 10^\circ$ se obtienen 820 conteos por hora. Encontrar el número atómico del cobre.

11. Demostrar que la constante de Planck tiene dimensiones de impulso angular.
12. Comparar la atracción gravitacional entre un electrón y un protón en el estado base de un átomo de hidrógeno con la atracción de Coulomb entre ellos mismos. ¿Está justificado el que se ignore la fuerza gravitacional?
13. Demostrar que la frecuencia de revolución del electrón en el átomo de hidrógeno del modelo de Bohr está dado por $\nu = 2|E|/h$ donde E es la energía total del electrón.
14. Demostrar que para todas las órbitas de Bohr la razón del momento magnético dipolar de la órbita electrónica al impulso angular orbital tiene el mismo valor.
15. (a) Demostrar que la rapidez del electrón en el estado base del átomo de hidrógeno se puede escribir como $v = \alpha c$ donde α es la constante de estructura fina. (b) A partir del valor de α ¿qué se podría concluir acerca del hecho de ignorar los efectos relativistas en los cálculos de Bohr?
16. ¿Cuáles son la energía, el impulso y la longitud de onda de un fotón emitido por un átomo de hidrógeno que sufre una transición directa desde un estado excitado con $n = 10$ al estado base? Encontrar la rapidez de retroceso del átomo de hidrógeno en este proceso.
17. (a) Calcular, utilizando la fórmula de Bohr, las tres longitudes de onda más largas en la serie de Balmer. (b) ¿Cuáles son los límites en longitudes de onda de la serie de Balmer?
18. Calcular las longitudes de onda más cortas de la serie de Lyman, Paschen y Pfund para el hidrógeno. ¿En qué región del espectro electromagnético se encuentra cada uno?
19. Según el modelo de Bohr, ¿Cuáles son: (a) el número cuántico, (b) el radio de la órbita, (c) el impulso angular, (d) el impulso lineal, (e) la velocidad angular, (f) la rapidez lineal, (g) la fuerza sobre el electrón, (h) la aceleración del electrón, (i) la energía cinética, (j) la energía potencial, y (k) la energía total para el estado base del átomo de hidrógeno? ¿Cómo varían las cantidades (b) y (k) con el número cuántico?
20. ¿Cuánta energía se requiere para quitar un electrón de un átomo de hidrógeno en un estado $n = 8$?
21. Se excita un átomo de hidrógeno desde un estado con $n = 1$ a uno con $n = 4$. (a) Calcular la energía que debe absorber el átomo. (b) Calcular y hacer un diagrama de niveles de energía de las distintas energías para los fotones que emitiría el átomo si regresara a su estado $n = 1$. (c) Calcular la rapidez de retroceso del átomo de hidrógeno, suponiéndolo inicialmente en reposo, cuando realiza la transición desde $n = 4$ hasta $n = 1$ en un solo salto cuántico.
22. Un átomo de hidrógeno en un estado con energía de enlace (energía necesaria para extraerle un electrón) de 0.85 eV realiza una transición a un estado con una energía de excitación (diferencia en energía entre el estado y el estado base) de 10.2 eV. (a) Encontrar la energía del fotón emitido. (b) Mostrar esta transición en un diagrama de niveles de energía para el hidrógeno, escribiendo los números cuánticos apropiados.
23. Sobre un diagrama de niveles de energía para el hidrógeno, mostrar los números cuánticos correspondientes a una transición en la cual la longitud de onda del fotón emitido es 1216 Å.
24. (a) Demostrar que cuando se toma en cuenta la energía cinética de retroceso del átomo, $p^2/2M$, la frecuencia de un fotón emitido en una transición entre dos niveles atómicos de diferencia de energía ΔE se reduce por un factor que es aproximadamente $(1 - \Delta E/2Mc^2)$. (Sugerencia: el impulso de retroceso es $p = h/\lambda$.) (b) Comparar la longitud de onda de la luz emitida cuando un átomo de hidrógeno sufre una transición $3 \rightarrow 1$, tomando en cuenta el retroceso y sin tomarlo en cuenta.
25. ¿Cuál es la longitud de onda del fotón con más energía que es capaz de emitir un átomo muónico con $Z = 1$?
26. Aplicar el modelo de Bohr a un átomo de helio ionizado, es decir, a un átomo de helio al cual se le ha quitado un electrón. ¿Qué relaciones existen entre este espectro y el espectro del hidrógeno?

27. Calcular, utilizando el modelo de Bohr, la energía necesaria para arrancar el electrón al helio simplemente ionizado.
28. En un experimento del tipo del de Franck-Hertz se bombardea hidrógeno atómico con electrones y se encuentra que los potenciales de excitación se presentan para 10.12 V y 12.10 V; (a) explicar por qué se observa que a estas excitaciones se presentan tres líneas distintas del espectro de emisión. (Sugerencia: haga un diagrama de niveles de energía). (b) Suponga que las diferencias de energía se pueden expresar como $h\nu$ y encontrar los tres valores permitidos de ν . (c) Suponga que ν es la frecuencia de la radiación emitida y determine las longitudes de onda de las líneas espectrales observadas.
29. En un experimento de Franck y Hertz, suponga que la energía electromagnética emitida por un átomo de Hg, generada por la energía absorbida de electrones de 4.9 eV, es igual a $h\nu$, donde ν es la frecuencia que corresponde a la línea de resonancia del mercurio de 2536 Å. Calcular el valor de h según el experimento de Franck y Hertz y compararlo con el valor de Planck.
30. La radiación de un ion de helio He^+ es aproximadamente igual en longitud de onda a la línea H_α (primera línea de la serie de Balmer). (a) ¿Entre qué estados (valores de n) ocurre la transición en el ion de helio? (b) ¿La longitud de onda es mayor o menor que la de la línea H_α ? (c) Calcular la diferencia de longitudes de onda.
31. En las estrellas en el espectro del He^+ se encuentra la serie de Pickering, que se emite cuando el electrón pasa desde niveles superiores al nivel $n = 4$. (a) Establecer la fórmula exacta para la longitud de onda de las líneas de esta serie. (b) ¿En qué región del espectro se encuentra esta serie? (c) Encontrar la longitud de onda del límite de la serie. (d) encontrar el potencial de ionización, en electronvolts, si el He^+ está en el estado base.
32. Supóngase que en un tubo que contiene hidrógeno ordinario es posible poner hidrógeno de número de masa tres (tritio) en cantidad suficiente como para realizar un examen espectroscópico. Determinar la separación de la línea normal del hidrógeno de la primera línea de la serie de Balmer que podría observarse. Expresar el resultado como una diferencia en longitud de onda.
33. Un tubo de descarga contiene los gases H^1 , H^2 , He^3 , He^4 , Li^6 y Li^7 atómicos e ionizados (el índice es la masa atómica), los últimos cuatro ionizados de manera que contienen solamente un electrón. (a) ¿Qué línea espectral aparecerá primero si el potencial a través del tubo se incrementa partiendo de cero. (b) Dar en orden creciente de frecuencia el origen de las líneas correspondientes a la primera línea de la serie de Lyman del H^1 .
34. Considérese un cuerpo que gira libremente alrededor de un eje fijo. Aplicando las reglas de cuantización de Wilson-Sommerfeld demuestre que los valores posibles de la energía total son

$$E = \hbar^2 n^2 / 2I \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

donde I es su inercia rotacional o momento de inercia alrededor del eje de rotación.

35. Suponga que el impulso angular de la tierra, cuya masa es de 6.0×10^{24} kg, debido a su movimiento alrededor del sol, con un radio de 1.5×10^{11} m, está cuantizado según la relación de Bohr $L = nh/2\pi$. ¿Cuál es el valor del número cuántico n ? ¿Podría detectarse esta cuantización?

Teoría de Schrödinger de la mecánica cuántica

5.1	Introducción	159
	Papel de la teoría de Schrödinger; limitaciones de los postulados de de Broglie; necesidad de la ecuación de onda diferencial.	
5.2	Argumentos de plausibilidad que conducen a la ecuación de Schrödinger	162
	Consistencia requerida con el postulado de de Broglie y la ecuación clásica de la energía; requisito de linealidad; supuesta solución senoidal para la partícula libre; fracaso de la solución real; éxito de la solución compleja; postulado de generalidad; relación con la teoría de Dirac; función de onda del oscilador armónico simple.	
5.3	Interpretación de Born de las funciones de onda	169
	Carácter complejo de las funciones de onda; funciones de onda como dispositivos de computación; densidades de probabilidad; postulado de Born; densidades de probabilidad clásica y cuántica del oscilador armónico simple; normalización; predicciones estadísticas de la mecánica cuántica.	
5.4	Valores de expectación	176
	Medidas repetidas y valor de expectación de la posición; valor de expectación de la posición del oscilador armónico simple; valor de expectación del impulso; operadores diferenciales; ecuaciones con operadores; asociaciones operador-variable; fórmula general para los valores de expectación; partícula en una caja.	
5.5	La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo	187
	Separación de variables; dependencia en el tiempo de las funciones de onda; discusión de la ecuación independiente del tiempo; eigenfunciones; argumento de plausibilidad para la ecuación independiente del tiempo.	

5.6 **Propiedades requeridas para las eigenfunciones** **192**

Finita, monovaluada y continuidad de las soluciones aceptables y sus primeras derivadas; justificación.

5.7 **Cuantización de la energía en la teoría de Schrödinger** **194**

Propiedades geométricas de las soluciones a la ecuación diferencial; curvatura; dificultad con el caracter finito de las soluciones a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo; energías totales discretas para las soluciones ligadas; continuo para las soluciones no ligadas; formas cualitativas de las eigenfunciones del oscilador armónico simple.

5.8 **Resumen** **203**

Eigenvalores, eigenfunciones, funciones de onda, números cuánticos y estados cuánticos; solución general a la ecuación de Schrödinger; densidades de probabilidad estática u oscilante y emisión de radiación por átomos.

Preguntas **205**

Problemas **207**

Teoría de Schrödinger de la mecánica cuántica

5.1 Introducción

Se han presentado evidencias experimentales que demuestran de manera contundente que las partículas de sistemas microscópicos se mueven de acuerdo con las leyes del movimiento ondulatorio de algún tipo, y no de acuerdo con las leyes newtonianas que obedecen las partículas de los sistemas macroscópicos. Por lo tanto, una partícula microscópica actúa como si ciertos aspectos de su comportamiento estuviera gobernado por el comportamiento de una onda asociada de de Broglie o una función de onda. Los experimentos considerados sólo tratan con casos simples (tales como partículas libres u osciladores armónicos simples, etc.) que se pueden analizar con procedimientos sencillos (que involucren la aplicación directa del postulado de de Broglie, postulado de Planck, etc.). Pero ciertamente es deseable el estar preparado para tratar los casos más complicados que ocurren en la naturaleza ya que son importantes e interesantes. Para hacer esto se deberá tener un procedimiento más general que se pueda utilizar para tratar el comportamiento de las partículas de cualquier sistema microscópico. *La teoría de Schrödinger de la mecánica cuántica* proporciona tal procedimiento.

Esta teoría especifica las leyes del movimiento ondulatorio que obedecen las partículas de cualquier sistema microscópico. Lo cual se hace especificando, para cada sistema, la ecuación que controla el comportamiento de la función de onda y especificando también la conexión entre el comportamiento de la función de onda y el comportamiento de la partícula. La teoría es una extensión del postulado de de Broglie. Más aún, existe una estrecha relación entre ella y la teoría de Newton del movimiento de partículas en sistemas macroscópicos. La teoría de Schrödinger es una generalización que incluye a la teoría de Newton como caso especial (en el límite macroscópico), de la misma manera que la teoría de Einstein de la relatividad es una generalización que incluye a la teoría de Newton como un caso especial (en el límite de velocidades bajas).

Se desarrollarán los puntos esenciales de la teoría de Schrödinger y se utilizarán para tratar un número de sistemas microscópicos importantes. Por ejemplo, se utilizará la teoría para obtener una comprensión detallada de las propiedades de los átomos, las cuales forman la base de gran parte de la química y de la física del estado sólido y que están íntimamente relacionados con las propiedades del núcleo.

Después de haber aplicado la teoría de Schrödinger a un número de casos el estudiante encontrará que empieza a desarrollar una intuición acerca del comportamiento de los sistemas mecánico-cuánticos, de la misma manera que desarrolló un sentimiento intuitivo para los sistemas clásicos provenientes de su estudio de la teoría de Newton y de las aplicaciones a cierto número de casos. Es posible hacer una comparación más realista entre la teoría de Schrödinger

y la teoría de Maxwell del electromagnetismo. La razón es que las ondas electromagnéticas se comportan de una manera completamente análoga a como lo hacen las funciones de onda de la teoría de Schrödinger. Cuando sea apropiada se utilizará esta analogía para demostrar la manera en la que están relacionados los resultados de la mecánica cuántica con los del electromagnetismo u otras formas del movimiento de las ondas clásicas que nos son más familiares. También se estudiarán muchos experimentos que confirmarán de manera directa los resultados que se obtendrán de la mecánica cuántica, de la misma manera como se han discutido muchos experimentos que sentaron las bases para la teoría. Pero el estudiante deberá ejercitar un poco la paciencia ya que hay mucho por hacer en el desarrollo de la teoría y trabajar sus consecuencias antes de que se puedan hacer comparaciones entre éstas y la experimentación.

Se ha visto que el postulado de de Broglie constituye un paso fundamental en el desarrollo de la teoría de Schrödinger del comportamiento de partículas microscópicas. Sin embargo, sólo es un paso. El postulado dice que el movimiento de una partícula microscópica está gobernado por la propagación de una onda asociada pero no dice cómo se propaga la onda. También predice de manera satisfactoria la longitud de onda que se infiere de las mediciones de los patrones de difracción observados en el movimiento de la partícula, pero solamente en los casos en los cuales la longitud de onda es esencialmente constante. Más aún, se contará con una relación cuantitativa entre las propiedades de la partícula y las propiedades de la función de onda que describe la onda. Esto es, se conocerá exactamente como la onda gobierna a la partícula.

En este capítulo se estudiará primero la ecuación, desarrollada por Erwin Schrödinger en 1925, que establece el comportamiento de cualquier función de onda de interés. A continuación se estudiará la relación desarrollada por Max Born en el año siguiente, que conecta el comportamiento de la función de onda con el comportamiento de la partícula asociada. Las soluciones detalladas a la ecuación de Schrödinger se reservan para los capítulos siguientes pero en este capítulo se verán sus soluciones en una forma general, así como la manera muy natural en la que conducen a la cuantización de la energía y otros fenómenos importantes.

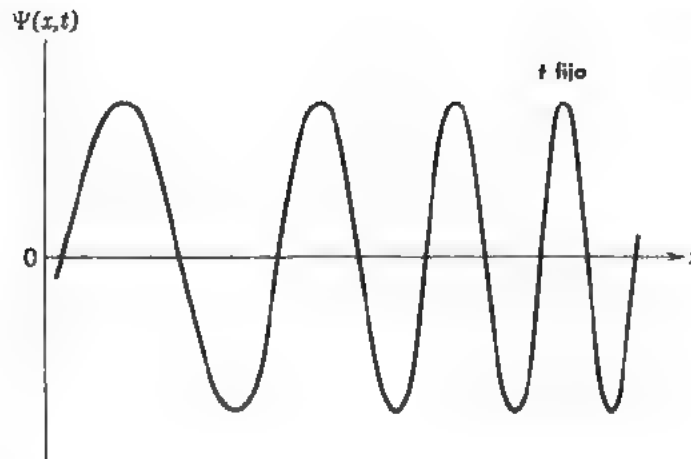
Se pueden analizar algunos de los problemas concernientes con la aplicabilidad del postulado de de Broglie y también trazar algunas pistas acerca de lo que se tendrá que hacer para resolver los problemas considerando nuevamente el caso de una partícula libre. En el capítulo 3, cuando fue necesario utilizar una expresión matemática para una función de onda se utilizó una onda viajera senoidal como

$$\Psi(x,t) = \text{sen } 2\pi \left(\frac{x}{\lambda} - \nu t \right) \quad (5-1)$$

o cualquier función de onda formada por la suma de varias senoidales. La forma de (5-1) se obtuvo esencialmente de manera tentativa basándose en el hecho de que una partícula libre tiene un impulso lineal p de magnitud constante, puesto que no está actuada por ninguna fuerza, y por lo tanto tiene asociada una longitud de onda de de Broglie $\lambda = h/p$ de magnitud constante. La ecuación (5-1) es justamente la forma usual para una onda senoidal viajera de longitud de onda constante λ que tiene también una frecuencia constante que se evaluará a partir de la relación de Einstein $\nu = E/h$, donde E es la energía total de la partícula asociada.

En el capítulo 4 fuimos capaces de extender el uso de una función de onda como la (5-1) a caso de una partícula que se mueve en una órbita circular de Bohr, imaginando a la onda senoidal como arrollada alrededor de la órbita. Pero esto fue posible solamente porque en una órbita circular de magnitud p , el impulso lineal permanece constante de modo que $\lambda = h/p$, la longitud de onda de de Broglie, también es constante a pesar de que la partícula es actuada por una fuerza.

No seremos capaces de hacer tales extensiones simples para tratar casos en los que el impulso lineal de la partícula cambia en magnitud y, por supuesto, estos casos son típicos de lo que sucede cuando una partícula está bajo la acción de una fuerza. El punto es que el postulado de de Broglie $\lambda = h/p$, establece que la longitud de onda λ cambia si cambia p ; pero una longitud de onda no está lo suficientemente bien definida si cambia muy rápidamente. Esto se muestra con

**FIGURA 5-1**

Onda no senoidal. Un análisis detenido mostrará que la separación entre un par de máximos adyacentes difiere de la separación entre mínimos adyacentes. Por lo tanto es difícil definir una longitud de onda aún para una sola oscilación.

la onda no senoidal de la figura 5-1. Aún para esta onda es difícil definir una longitud de onda variable ya que la separación entre máximos adyacentes no es igual a la separación entre mínimos adyacentes. Desde otro punto de vista, si el impulso lineal de una partícula no tiene magnitud constante debido a que la partícula está sujeta a la acción de una fuerza, se requieren funciones que son más complicadas que la senoidal de (5-1) para describir la onda asociada. Para encontrar estas funciones de onda más complicadas se necesitará ayuda.

La *ecuación de Schrödinger* proporcionará la ayuda necesaria. Esta es la ecuación que establece la forma de la función de onda $\Psi(x, t)$, si decimos la fuerza que actúa sobre la partícula asociada especificando la energía potencial que corresponde a dicha fuerza. En otras palabras, la función de onda es una solución a la ecuación de Schrödinger para esa energía potencial. El tipo más común de ecuación que tiene como solución a una función es una *ecuación diferencial*. De hecho, la ecuación de Schrödinger es una ecuación diferencial. Esto es, la ecuación es una relación entre su solución $\Psi(x, t)$ y ciertas derivadas de $\Psi(x, t)$ con respecto a las variables independientes de espacio y tiempo x y t . Como hay más de una variable independiente las derivadas deberán ser *derivadas parciales*, tales como

$$\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} \quad \text{o} \quad \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \quad \text{o} \quad \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} \quad \text{o} \quad \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial t^2} \quad (5-2)$$

Ejemplo 5-1. Evaluar las derivadas parciales listadas arriba para la función senoidal (5-1).

Una derivada parcial es una derivada de una función de varias variables independientes, que se evalúa permitiendo que una de las variables varíe mientras las otras se mantienen fijas. Esto se indica utilizando el símbolo tal como $\partial \Psi(x, t) / \partial x$ en vez del símbolo usual para la derivada ordinaria $d\Psi(x, t) / dx$. El símbolo significa, por ejemplo

$$\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} \equiv \left[\frac{d\Psi(x, t)}{dx} \right]_{\text{Evaluada con } t \text{ constante}} \quad (5-3)$$

$$\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \equiv \left[\frac{d\Psi(x, t)}{dt} \right]_{\text{Evaluada con } x \text{ constante}} \quad (5-4)$$

Antes de aplicar este procedimiento a la función senoidal (5-1) es conveniente volver a escribirla en términos de las cantidades $k = 2\pi/\lambda$ y $\omega = 2\pi\nu$. Se obtiene

$$\Psi(x, t) = \text{sen } 2\pi \left(\frac{x}{\lambda} - \nu t \right) = \text{sen } (kx - \omega t)$$

La diferenciación parcial conduce a

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} &= \frac{\partial \text{sen}(kx - \omega t)}{\partial x} = k \cos(kx - \omega t) \\ \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} &= k \frac{\partial \cos(kx - \omega t)}{\partial x} = -k^2 \text{sen}(kx - \omega t) \\ \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} &= \frac{\partial \text{sen}(kx - \omega t)}{\partial t} = -\omega \cos(kx - \omega t) \\ \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial t^2} &= -\omega \frac{\partial \cos(kx - \omega t)}{\partial t} = -\omega^2 \text{sen}(kx - \omega t) \end{aligned} \quad (5-5)$$

puesto que t se puede tratar como una constante en las dos primeras diferenciaciones, mientras que x se puede tratar como una constante en las dos últimas. En breve se probará que estos resultados son útiles.

La ecuación de Schrödinger es una ecuación diferencial parcial. En el contexto se estudiarán soluciones a esta ecuación y se verá que generalmente es muy fácil descomponerla en un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias (es decir, ecuaciones diferenciales que sólo involucren derivadas ordinarias). Estas ecuaciones diferenciales ordinarias serán manejadas entonces mediante la aplicación de técnicas directas. En todo este trabajo se supondrá que el estudiante no tiene conocimiento previo acerca de ecuaciones diferenciales de ningún tipo. Sólo se supondrá que sabe cómo diferenciar e integrar. Por supuesto que en conexión con su estudio de la mecánica clásica, es muy probable que el estudiante tenga alguna experiencia con ecuaciones diferenciales ordinarias. Probablemente tenga también una poca de experiencia con ecuaciones diferenciales parciales ya que la ecuación de Schrödinger es un miembro de la clase de las ecuaciones diferenciales parciales denominadas ecuaciones de onda, las cuales ocurren en muchos campos tanto de la física clásica como de la cuántica. Ejemplos que aparecen en la física clásica son las ecuaciones de onda para vibraciones en una cuerda tensa y la ecuación de onda para la radiación electromagnética. Se verá que la ecuación de onda en la mecánica cuántica tiene muchas propiedades en común con la ecuación de onda clásica y que también tiene algunas diferencias muy interesantes.

5.2 Argumentos de plausibilidad que conducen a la ecuación de Schrödinger

Ahora el primer problema que se presenta no es cómo resolver cierta ecuación diferencial; sino que el problema es cómo *encontrar* la ecuación. Esto es, se está en la posición de Newton cuando estaba buscando la ecuación diferencial

$$F = \frac{dp}{dt} = m \frac{d^2x}{dt^2} \quad (5-6)$$

que es la ecuación básica de la mecánica clásica, o de Maxwell cuando buscaba las ecuaciones diferenciales

$$\frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} + \frac{\partial E_z}{\partial z} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (5-7)$$

que forman la base del electromagnetismo clásico.

La ecuación de onda para una cuerda tensa se puede derivar de la ley de Newton y la ecuación de onda electromagnética se puede derivar de las ecuaciones de Maxwell; pero no se puede esperar ser capaces de derivar la ecuación de onda de la *mecánica cuántica* de ninguna de las ecuaciones de la *física clásica*. Sin embargo, se puede esperar alguna ayuda de los postulados de de Broglie-Einstein.

$$\lambda = h/p \text{ y } \nu = E/h \quad (5-8)$$

que asocian la longitud de onda λ de la función de onda con el impulso lineal p de la partícula asociada y la frecuencia ν de la función de onda con la energía total E de la partícula, para el caso de una partícula con p y E esencialmente constantes. Esto es, se buscará que la ecuación de onda de la mecánica cuántica sea congruente con estos postulados y se utilizará este requisito de coincidencia en esta investigación. Las ecuaciones (5-8) más otras que se tendrán razones para aceptar, desembocarán en un argumento que está planeado para hacer que la ecuación de onda mecánico-cuántica parezca posible, pero deberá hacerse énfasis que este *argumento de plausibilidad* no constituye una derivación. En el análisis final, la ecuación de onda mecánico-cuántica deberá obtenerse de un *postulado*, cuya justificación no es el que haya sido deducida por completo a partir de la información experimental ya conocida, sino que predice correctamente los resultados que se pueden verificar experimentalmente.

Se empezará este argumento de plausibilidad enlistando cuatro suposiciones razonables concernientes a las propiedades deseables de la ecuación de onda mecánico-cuántica:

1. Deberá ser coincidente con los postulados de de Broglie-Einstein. (5-8)

$$\lambda = h/p \text{ y } \nu = E/h$$

2. Deberá ser coincidente con la ecuación

$$E = p^2/2m + V \quad (5-9)$$

que relaciona la energía total E de una partícula de masa m con su energía cinética $p^2/2m$ y su energía potencial V .

3. Deberá ser *lineal* en $\Psi(x,t)$. Esto es, si $\Psi_1(x,t)$ y $\Psi_2(x,t)$ son dos soluciones diferentes a la ecuación para una energía potencial dada V (se verá que las ecuaciones diferenciales parciales tienen muchas soluciones), entonces cualquier combinación lineal arbitraria de estas soluciones $\Psi(x,t) = c_1\Psi_1(x,t) + c_2\Psi_2(x,t)$, también es solución. Se dice que esta combinación es *lineal* ya que contiene la primera potencia (lineal) de $\Psi_1(x,t)$ y $\Psi_2(x,t)$; se dice que es *arbitraria* ya que las constantes c_1 y c_2 pueden tener cualesquiera valores (arbitrarios). Este requisito de *linealidad* asegura que se podrá *sumar funciones de onda* para producir las interferencias constructivas y destructivas de las ondas. Los fenómenos de interferencia son comunes para las ondas electromagnéticas; todos los patrones de difracción de la óptica física se explican en términos de la adición de ondas electromagnéticas. Pero el experimento de Davisson-Germer muestra que los patrones de difracción también se encuentran en el movimiento de electrones y otras partículas. Por lo tanto, sus funciones de onda también presentan interferencias de manera que deberán ser susceptibles de sumarse.

4. La energía potencial V generalmente es una función de x y posiblemente de t . Sin embargo, existe un caso especial importante cuando

$$V(x,t) = V_0 \quad (5-10)$$

Que es justamente el caso de una partícula libre ya que la fuerza que actúa sobre la partícula está dada por

$$F = -\partial V(x,t)/\partial x$$

lo cual produce $F = 0$ si V_0 es una constante. En este caso la ley de Newton del movimiento afirma que el impulso lineal p de la partícula será constante y también se sabe que su energía

total E será constante. Aquí se tiene la situación de una partícula libre con valores constantes de $\lambda = h/p$ y $\nu = E/h$ que se discutió en el capítulo 3. Por lo tanto se supondrá que, en este caso, la ecuación diferencial deseada tendrá como soluciones ondas senoidales viajeras de longitud y frecuencia constantes, similares a la función de onda senoidal (5-1), considerada en este capítulo.

Utilizando las relaciones de de Broglie-Einstein de la suposición 1, para escribir la ecuación de energía de la suposición 2 en términos de λ y ν , se obtiene

$$h^2/2m\lambda^2 + V(x,t) = h\nu$$

Antes de continuar resulta conveniente introducir las cantidades

$$k = 2\pi/\lambda \quad \text{y} \quad \omega = 2\pi\nu \quad (5-11)$$

Como en el ejemplo 5-1, estas cantidades resultan útiles ya que eliminan las variables de los denominadores y porque "absorben" un factor de 2 que de otra manera aparecería siempre que se escribiera una función de onda senoidal. A la cantidad k se le denomina *número de onda* y a la cantidad, ω *frecuencia angular*. Introduciéndolas se obtiene

$$\hbar^2 k^2 / 2m + V(x,t) = \hbar\omega \quad (5-12)$$

donde

$$\hbar \equiv h/2\pi$$

es la constante de Planck dividida 2π . Para satisfacer las suposiciones 1 y 2 la ecuación de onda deberá de ser congruente con (5-12).

Para satisfacer la suposición de linealidad 3 es necesario que cada término en la ecuación diferencial sea lineal en $\Psi(x,t)$, es decir, sea proporcional a la primera potencia de $\Psi(x,t)$. Obsérvese que cualquier derivada de $\Psi(x,t)$ tiene esta propiedad. Por ejemplo, si se considera el cambio en la magnitud de $\partial^2 \Psi(x,t) / \partial x^2$ que resulta de cambiar la magnitud de $\Psi(x,t)$, digamos por un factor c , se ve que la derivada aumenta por el mismo factor y por lo tanto es proporcional a la primera potencia de la función. Lo cual es cierto ya que

$$\frac{\partial^2 [c\Psi(x,t)]}{\partial x^2} = c \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2}$$

donde c es cualquier constante. Para que la ecuación diferencial misma sea lineal en $\Psi(x,t)$, no deberá contener ningún término que sea independiente de $\Psi(x,t)$, es decir, que sea proporcional a $[\Psi(x,t)]^0$, o proporcional a $[\Psi(x,t)]^2$ o a cualquier potencia superior. Después de obtener la ecuación se demostrará explícitamente que ésta es lineal en $\Psi(x,t)$, y en este proceso será evidente la validez de estas aseveraciones.

A continuación se utilizará la suposición 4 que trata con la forma de la solución de la partícula libre; como se sugiere, primero se tratará de escribir una ecuación que contenga una función de onda senoidal (5-1) y/o derivadas de la función de onda. En el ejemplo 5-1 ya se han evaluado algunas de las derivadas. Observándolas se ve que el efecto de tomar la segunda derivada del espacio es introducir un factor $-k^2$ y el efecto de tomar la primera derivada en el tiempo es introducir un factor $-\omega$. Ya que se espera que la ecuación diferencial sea consistente con (5-12) que contiene un factor k^2 en un término y un factor ω en otro, se sugiere que la ecuación diferencial deberá contener una segunda derivada espacial de $\Psi(x,t)$ y una primera derivada temporal de $\Psi(x,t)$. Pero también deberá haber un término que contenga un factor de $V(x,t)$ ya que éste aparece en (5-12). Para asegurar la linealidad, este término deberá contener un factor de $\Psi(x,t)$. Uniendo todas estas ideas se intentará la siguiente forma para la ecuación diferencial

$$\alpha \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi(x,t) = \beta \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} \quad (5-13)$$

Las constantes α y β tienen valores a determinarse. Y se utilizan para dar la flexibilidad que, se supone, será necesaria para que (5.13) satisfaga los distintos requisitos.

En general la forma de (5.13) parece razonable, pero ¿funcionará en detalle? Para responderlo considere el caso de un potencial constante $V(x, t) = V_0$, y evalúe $\Psi(x, t)$ y sus derivadas a partir de (5.1) y (5.5), obteniéndose

$$-\alpha \sin(kx - \omega t)k^2 + \sin(kx - \omega t)V_0 = -\beta \cos(kx - \omega t)\omega \quad (5-14)$$

No obstante que las constantes α y β están a nuestra disposición, no es posible satisfacer (5.12) y las suposiciones 1 y 2 excepto para combinaciones especiales de las variables independientes x y t para las cuales $\sin(kx - \omega t) = \cos(kx - \omega t)$. Es cierto que se podría obtener un acuerdo si α y β fueran constantes, pero esta posibilidad se ha descartado en favor de una mucho más simple que se presentará a continuación.

La dificultad surge debido a los cambios de cosenos en senos y viceversa provenientes de la diferenciación. Este hecho sugiere que para la función de onda de la partícula libre se utilice en vez de la senoidal simple (5.1), la combinación

$$\Psi(x, t) = \cos(kx - \omega t) + \gamma \sin(kx - \omega t) \quad (5-15)$$

donde γ es una constante de valor indeterminado por el momento y que se introduce con el propósito de proporcionar una flexibilidad adicional. Se espera encontrar la mezcla apropiada de cosenos y senos que eliminen la dificultad. Evaluando las derivadas necesarias se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} &= -k \sin(kx - \omega t) + k\gamma \cos(kx - \omega t) \\ \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} &= -k^2 \cos(kx - \omega t) - k^2 \gamma \sin(kx - \omega t) \\ \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} &= \omega \sin(kx - \omega t) - \omega \gamma \cos(kx - \omega t) \end{aligned} \quad (5-16)$$

Enseguida, substituyendo (5.15) y (5.16) en (5.13) que es la forma supuesta para la ecuación diferencial y haciendo $V(x, t) = V_0$ se obtiene

$$\begin{aligned} -\alpha k^2 \cos(kx - \omega t) - \alpha k^2 \gamma \sin(kx - \omega t) + V_0 \cos(kx - \omega t) \\ + V_0 \gamma \sin(kx - \omega t) = \beta \omega \sin(kx - \omega t) - \beta \omega \gamma \cos(kx - \omega t) \end{aligned}$$

$$[-\alpha k^2 + V_0 + \beta \omega \gamma] \cos(kx - \omega t) + [-\alpha k^2 \gamma + V_0 \gamma - \beta \omega] \sin(kx - \omega t) = 0$$

Para que la última igualdad ocurra para todas las combinaciones posibles de las variables independientes x y t , es necesario que los coeficientes de los cosenos y de los senos sean cero. Entonces se obtiene

$$-\alpha k^2 + V_0 = -\beta \gamma \omega \quad (5-17)$$

$$-\alpha k^2 \gamma + V_0 \gamma = \beta \omega \quad (5-18)$$

Ahora se tiene un problema fácil de manejar; existen tres ecuaciones algebraicas que habrán de satisfacerse, (5.12), (5.17) y (5.18) pero se tienen a la disposición tres constantes libres α , β , y γ . Restando (5.18) de (5.17) se obtiene

$$0 = -\beta \gamma \omega - \beta \omega / \gamma$$

o

$$\gamma = -1/\gamma$$

de modo que,

$$\gamma^2 = -1$$

o

$$\gamma = \pm\sqrt{-1} \equiv \pm i \quad (5-19)$$

donde i es el *número imaginario* (ver apéndice E). Substituyendo este resultado en (5-17) se obtiene

$$-\alpha k^2 + V_0 = \mp i\beta\omega$$

que se puede comparar directamente con (5-12)

$$\hbar^2 k^2 / 2m + V_0 = \hbar\omega$$

para obtener

$$\alpha = -\hbar^2 / 2m \quad (5-20)$$

y

$$\mp i\beta = \hbar$$

o

$$\beta = \pm i\hbar \quad (5-21)$$

Existen dos posibilidades para el signo en (5-19) y resulta que no es importante la elección que se haga por lo que se seguirá la convención de escoger el signo más. Entonces (5-21) da $\beta = +i\hbar$ y con (5-20) se pueden evaluar todas las constantes que aparecen en la forma supuesta de la ecuación diferencial. Entonces (5-13) resulta en

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} \quad (5-22)$$

Esta ecuación diferencial satisface las cuatro suposiciones hechas para la ecuación de onda mecánico-cuántica.

Deberá hacerse énfasis en que se ha llegado a (5-22) tratando un caso especial: el caso de una partícula libre donde $V(x,t) = V_0$, es una constante. En este punto parece plausible argumentar que cabría esperar que la ecuación de onda mecánico-cuántica debería tener la misma forma que (5-22) en el caso general en el que la energía potencial $V(x,t)$ varía como una función de x y t (es decir, donde la fuerza no es cero); pero no se puede probar que esto es cierto. Sin embargo, es posible *postularlo*. Se hace y por lo tanto se toma a (5-22) como la ecuación de onda mecánico-cuántica cuyas soluciones $\Psi(x,t)$ son las funciones de onda asociadas con el movimiento de una partícula de masa m que se encuentra bajo la influencia de fuerzas que están descritas por la función energía potencial $V(x,t)$. La validez del postulado habrá de juzgarse mediante la comparación de sus implicaciones con la experimentación y se harán muchas de ellas un poco después. La ecuación (5-22) fue obtenida por primera vez en 1926 por Erwin Schrödinger y por ello se le conoce como la *ecuación de Schrödinger*.

Schrödinger llegó a su ecuación mediante un argumento diferente a éste (y más esotérico). En la sección 5-4 se verán las ideas esenciales de su argumento. Sin embargo, él estuvo fuertemente influenciado en su trabajo por el postulado de de Broglie, como lo hemos estado nosotros en éste. Esto se puede ver en la cita siguiente, en la que el físico Debye describe las circunstancias en las que Schrödinger desarrolló su ecuación.

"Entonces de Broglie publicó su artículo. En este tiempo Schrödinger era mi sucesor en la Universidad de Zurich y yo estaba en la Universidad Técnica, que es un instituto federal, y tuvimos un coloquio juntos. Estuvimos hablando acerca de la teoría de de Broglie, coincidiendo en que no la entendíamos y que deberíamos pensar realmente sobre sus formulaciones y lo que significan. Invité a Schrödinger a que nos diera un coloquio sobre el tema y la preparación que realmente él hubiera obtenido. Existieron solamente unos cuantos meses entre su plática y sus publicaciones".

Cabe apuntar que no es posible esperar que la ecuación de Schrödinger sea válida cuando se aplica a partículas que se mueven a velocidades relativistas. Esto es así, ya que la ecuación fue diseñada para ser congruente con (5-9) que es la ecuación de la energía clásica y que es incorrecta para velocidades comparables con la velocidad de la luz. En 1928 Dirac desarrolló una teoría relativista de la mecánica cuántica utilizando esencialmente los mismos postulados de la teoría de Schrodinger, excepto que (5-9) se substituyó por su análogo relativista

$$E = \sqrt{c^2 p^2 + (m_0 c^2)^2} + V$$

Por supuesto que la teoría de Dirac se reduce a la teoría de Schrödinger en el límite de velocidades bajas. Debido a las complicaciones serias que introduce la raíz cuadrada de la ecuación relativista de la energía, no resulta apropiado introducir un tratamiento cuantitativo de la teoría de Dirac en este libro. Sin embargo algunos de los rasgos más interesantes de la teoría de Dirac se describirán cualitativamente en los siguientes capítulos en las ocasiones en las que se discutan los fenómenos cuánticos relativistas; ya se ha descrito uno de ellos: la producción de pares. Afortunadamente la mayoría de los fenómenos cuánticos interesantes se pueden estudiar en casos que no son relativistas.

Ejemplo 5-2. Verificar que la ecuación de Schrödinger es lineal en la función de onda $\Psi(x, t)$; es decir, que coincide con la suposición de linealidad 3.

Habrà de mostrarse que si $\Psi_1(x, t)$ y $\Psi_2(x, t)$ son dos soluciones a (5-22) para una $V(x, t)$ particular, entonces

$$\Psi'(x, t) = c_1 \Psi_1(x, t) + c_2 \Psi_2(x, t)$$

también es una solución a esta ecuación, donde c_1 y c_2 son constantes de valor arbitrario, (5-22) igualada a cero se tiene la ecuación de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi'}{\partial x^2} + V \Psi' - i\hbar \frac{\partial \Psi'}{\partial t} = 0$$

A continuación se comprueba la validez de la combinación lineal substituyéndola en esta ecuación que supuestamente debe satisfacer. Se obtiene

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(c_1 \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial x^2} + c_2 \frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x^2} \right) + V(c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2) - i\hbar \left(c_1 \frac{\partial \Psi_1}{\partial t} + c_2 \frac{\partial \Psi_2}{\partial t} \right) = 0$$

que se puede reescribir como

$$c_1 \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial x^2} + V \Psi_1 - i\hbar \frac{\partial \Psi_1}{\partial t} \right] + c_2 \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x^2} + V \Psi_2 - i\hbar \frac{\partial \Psi_2}{\partial t} \right] = 0$$

si realmente la combinación lineal es una solución a la ecuación de Schrödinger deberá satisfacerse la última igualdad. Esto es para todos los valores de c_1 y c_2 ya que la ecuación de Schrodinger afirma que cada uno de los paréntesis será igual a cero puesto que Ψ_1 y Ψ_2 son soluciones de la ecuación para la misma V .

Un razonamiento sencillo convencerá al estudiante que este resultado esencial no se obtendría si la ecuación de Schrödinger contuviera algún término que no fuera proporcional a la primera potencia de $\Psi'(x, t)$.

En los siguientes capítulos se resolverá en una forma metódica la ecuación de Schrödinger para un número de sistemas importantes y se obtendrán las funciones de onda que describen a los sistemas. Pero en este capítulo se utilizarán algunas de estas funciones de onda para ilustrar varias propiedades de la teoría de Schrödinger. Cuando se requiera, estas funciones de onda "se sacarán del sombrero". Sin embargo, se dará al estudiante confianza en su validez verificando que cada una es una solución a la ecuación de Schrödinger, para el sistema en cuestión, por el procedimiento simple de sustituirla en la ecuación. Esto se hace en el ejemplo 5-3 para una función de onda que es particularmente útil para propósitos de ejemplificación.

Ejemplo 5-3. La función de onda $\Psi(x,t)$ para el estado de energía más bajo de un oscilador armónico simple, que consiste de una partícula de masa m actuada por una fuerza de restitución lineal con constante de fuerza C , se puede expresar como

$$\Psi(x,t) = Ae^{-(\sqrt{Cm/2\hbar})x^2}e^{-(i/2)\sqrt{C/m}t}$$

donde la constante real A puede tener cualquier valor. Verificar que esta expresión es una solución a la ecuación de Schrödinger para el potencial apropiado. (El término dependiente del tiempo es una exponencial compleja; ver apéndice E).

La expresión se aplica al caso en el cual el punto de equilibrio del oscilador (el punto en el cual la partícula clásica estaría en reposo si no oscilara) está en el origen del eje x ($x = 0$). En este caso, la energía potencial independiente del tiempo es

$$V(x,t) = V(x) = Cx^2/2$$

como puede verificarse observando que la fuerza correspondiente $F = -dV(x)/dx = -Cx$ es una fuerza de restitución lineal con constante de fuerza C . La ecuación de Schrödinger para este potencial es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{C}{2} x^2 \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

Para comprobar la validez de la solución propuesta se evalúan sus derivadas encontrándose

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i}{2} \sqrt{\frac{C}{m}} \Psi$$

y

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi}{\partial x} &= -\frac{\sqrt{Cm}}{2\hbar} 2x\Psi = -\frac{\sqrt{Cm}}{\hbar} x\Psi \\ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} &= -\frac{\sqrt{Cm}}{\hbar} \Psi - \frac{\sqrt{Cm}}{\hbar} x \left(-\frac{\sqrt{Cm}}{\hbar} x\Psi \right) \\ &= -\frac{\sqrt{Cm}}{\hbar} \Psi + \frac{Cm}{\hbar^2} x^2 \Psi \end{aligned}$$

Que substituidas en la ecuación de Schrödinger dan

$$\frac{\hbar^2 \sqrt{Cm}}{2m\hbar} \Psi - \frac{\hbar^2 Cm}{2m\hbar^2} x^2 \Psi + \frac{C}{2} x^2 \Psi = i\hbar \left(-\frac{i}{2} \right) \sqrt{\frac{C}{m}} \Psi$$

o

$$\frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{C}{m}} \Psi - \frac{C}{2} x^2 \Psi + \frac{C}{2} x^2 \Psi = \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{C}{m}} \Psi$$

Puesto que la última igualdad se satisface, la solución es válida.

En el siguiente capítulo se tratará la solución general a la ecuación de Schrödinger del oscilador armónico simple.

5.3 Interpretación de Born de las funciones de onda

Una propiedad muy importante e interesante de las funciones de onda se puede ver evaluando $\Psi = i$ en (5-15) que especifica la forma de las funciones de onda de la partícula libre, obteniéndose

$$\Psi(x,t) = \cos(kx - \omega t) + i \sin(kx - \omega t) \quad (5-23)$$

una *función de onda compleja*; esto es, contiene al número imaginario i . Recordando que el comportamiento fue forzado por nosotros, tratemos primero de encontrar una forma de satisfacer las cuatro suposiciones concernientes a la ecuación de Schrödinger, utilizando una función de onda real para la partícula libre (5-1) y se encontrará que ésta no fue una forma razonable de hacerlo. Solamente se ha tenido éxito cuando se le permite a la función de onda de la partícula libre tener una parte imaginaria, utilizando la función de onda (5-15) en la cual se ha hecho γ igual a i . En este proceso también se ha terminado con una i en la ecuación de Schrödinger (5-22). Si el estudiante observa cuidadosamente el argumento de plausibilidad resultará evidente que la ecuación contiene una i debido a que ésta relaciona una *primera derivada en el tiempo* con una *segunda derivada en el espacio*; lo cual es debido al hecho de que la ecuación de Schrödinger está basada en la ecuación de la energía que relaciona la primera potencia de la energía total con la segunda potencia del impulso. La presencia de una i en la ecuación de Schrödinger implica que, en el caso general (para cualquier función energía potencial), las funciones de onda que son sus soluciones serán complejas. En breve se verá que esto es cierto.

Puesto que una función de onda de la mecánica cuántica es compleja especifica simultáneamente dos funciones reales, su parte *real* y su parte *imaginaria* (ver apéndice E). Esto está en contraste con una "función de onda de la mecánica clásica". Por ejemplo una onda en una cuerda se puede especificar mediante una función real que da el desplazamiento de varios elementos de la cuerda en varios instantes de tiempo. La función de onda clásica no es compleja debido a que la función de onda clásica no contiene una i , ya que ésta relaciona una segunda derivada en el tiempo con una segunda derivada en el espacio.

El hecho de que las funciones de onda sean funciones complejas no deberá considerarse como un punto débil de la teoría de la mecánica cuántica. En realidad este es un detalle deseable ya que de inmediato hace evidente que no se debería intentar dar a las funciones de onda una existencia física, en el mismo sentido que la tienen las ondas en el agua. La razón es que una cantidad compleja no se puede medir por ningún instrumento físicamente real. El mundo "real" (utilizando el término en su sentido no matemático) es el mundo de las cantidades "reales" (utilizando el término en su sentido matemático).

Por lo tanto, no se deberá responder, ni siquiera plantear la pregunta: ¿Qué es exactamente ondular y qué es lo que está ondulado? El estudiante recordará que consideraciones de preguntas como ésta, concernientes a la naturaleza de las ondas electromagnéticas, condujeron a los físicos del siglo XIX al concepto erróneo del éter. Como las funciones de onda son complejas, no existe la tentación de cometer otra vez el mismo error. Por el contrario, resulta evidente desde el principio que las *funciones de onda* son *dispositivos computacionales* que solamente tienen significado en el contexto de la teoría de Schrödinger de la cual forman parte. Estos comentarios, no deberán tomarse para implicar que las funciones de onda no tienen interés físico. En esta sección y en las siguientes se verá que una función de onda contiene en realidad toda la información que el principio de incertidumbre permite conocer acerca de la partícula asociada.

La conexión básica entre las propiedades de la función de onda $\Psi(x,t)$ y el comportamiento de la partícula asociada está expresada en términos de la *densidad de probabilidad* $P(x,t)$. Esta cantidad especifica la probabilidad, por unidad de longitud del eje x de encontrar a la partícula en la vecindad de la coordenada x al tiempo t . Según un *postulado*, enunciado inicialmente por Max Born en 1926, la relación entre la densidad de probabilidad y la función de onda es

$$P(x,t) = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t) \quad (5-24)$$

donde el símbolo $\Psi^*(x,t)$, representa el *complejo conjugado* de $\Psi(x,t)$ (ver apéndice E). Para aclarar y hacer énfasis se volverá a enunciar el postulado de Born como sigue:

Si en el instante t se realiza una medición para localizar a la partícula asociada con la función de onda $\Psi^(x,t)$ entonces la probabilidad $P(x,t) dx$ de encontrar a la partícula en una coordenada entre x y $x + dx$ es igual a $\Psi^*(x,t)\Psi(x,t) dx$.*

La justificación del postulado se puede encontrar en las consideraciones siguientes. Puesto que el movimiento de una partícula está conectado con la propagación de una función de onda asociada (la conexión de de Broglie), estos dos entes deberán estar asociados en el espacio. Esto es, la partícula deberá estar en algún sitio en el que las ondas tengan una amplitud apreciable. Por lo tanto $P(x,t)$ deberá tener un valor apreciable donde $\Psi(x,t)$ tenga un valor apreciable. En la figura 5-2 se intenta ilustrar esquemáticamente la situación. Si la situación fuera distinta existirían serias dificultades con la teoría. Por ejemplo, si la partícula estuviera en el espacio separada de la onda, surgirían problemas relativistas debido al tiempo requerido para transmitir información necesaria para que los entes se sigan uno al otro. Puesto que la cantidad mensurable densidad de probabilidad $P(x,t)$ es real y no negativa, mientras que la función de onda $\Psi(x,t)$ $P(x,t)$ es compleja, obviamente no es posible igualar $P(x,t)$ con $\Psi(x,t)$. Sin embargo, puesto que $\Psi^*(x,t)\Psi(x,t)$ siempre es real y no negativa, Born no fue inconsistente al igualarla con $P(x,t)$.

Ejemplo 5-4. Demuestra que $\Psi^*(x,t)\Psi(x,t)$ es necesariamente real y positiva o cero.

Como cualquier función compleja, $\Psi(x,t)$, siempre se puede escribir

$$\Psi(x,t) = R(x,t) + iI(x,t) \quad (5-25a)$$

donde $R(x,t)$ e $I(x,t)$ son funciones reales denominadas, *parte real* e *imaginaria* respectivamente. El complejo conjugado de $\Psi(x,t)$ está definido como

$$\Psi^*(x,t) \equiv R(x,t) - iI(x,t) \quad (5-25b)$$

Multiplicando miembro a miembro se obtiene

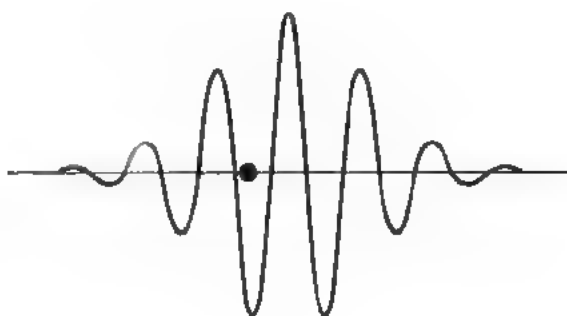
$$\Psi^*\Psi = (R - iI)(R + iI)$$

o, puesto que

$$\Psi^*\Psi = R^2 - i^2I^2 = R^2 + I^2$$

FIGURA 5-2

Descripción muy esquemática de una función de onda y su partícula asociada. La partícula deberá estar en algún lugar donde la función de onda tenga una amplitud apreciable.



Entonces,

$$\Psi^*(x,t)\Psi(x,t) = [R(x,t)]^2 + [I(x,t)]^2 \quad (5-26)$$

esto es, es igual a la suma de los cuadrados de dos funciones reales. Entonces $\Psi^*(x,t)\Psi(x,t)$ deberá ser real y positiva o cero.

Por supuesto, existen otras funciones posibles que se pueden generar a partir de $\Psi(x,t)$ y que son reales. Un ejemplo es el valor absoluto o módulo $|\Psi(x,t)|$. Sin embargo, todas estas posibilidades se pueden eliminar mediante argumentos, muy largos para reproducirlos aquí, los cuales demuestran que ellas conducirían a un comportamiento no físico de $P(x, t)$.

Es importante para nosotros considerar nuevamente una analogía entre el electromagnetismo y la mecánica cuántica que se discutió en la sección 3-2. La conexión entre la densidad de fotones en un campo de radiación electromagnética y el cuadrado del vector del campo eléctrico es análoga a la conexión entre la densidad de probabilidad y la función de onda multiplicada por su complejo conjugado. Considérese, por ejemplo, que el vector de campo eléctrico es una solución a la ecuación de onda electromagnética mientras que la función de onda es una solución a la ecuación de onda mecánico-cuántica. Ambas cantidades especifican las amplitudes de las ondas, pero mientras que el vector eléctrico es real, la función de onda es compleja. Por lo tanto, el cuadrado de las ondas, E^2 , da la intensidad de las ondas en el caso electromagnético, mientras que es necesario tomar la amplitud multiplicada por su complejo conjugado, $\Psi^*\Psi$, para obtener una intensidad real en el caso mecánico-cuántico. En el caso electromagnético la intensidad de las ondas es proporcional a su densidad de energía. Puesto que en el campo electromagnético cada fotón lleva una energía $h\nu$, la densidad de energía es proporcional a la densidad de fotones. Para una dimensión es la probabilidad por unidad de longitud de encontrar a un fotón. En el caso mecánico-cuántico la intensidad de las ondas dan directamente la densidad de probabilidad que en una dimensión es la probabilidad por unidad de longitud de encontrar la partícula.

Ejemplo 5-5. Evaluar la densidad de probabilidad para la función del estado de menor energía del oscilador armónico simple del ejemplo 5-3.

La función de onda es

$$\Psi(x,t) = Ae^{-(\sqrt{Cm/2\hbar})x^2}e^{-(i/2)\sqrt{C/m}t}$$

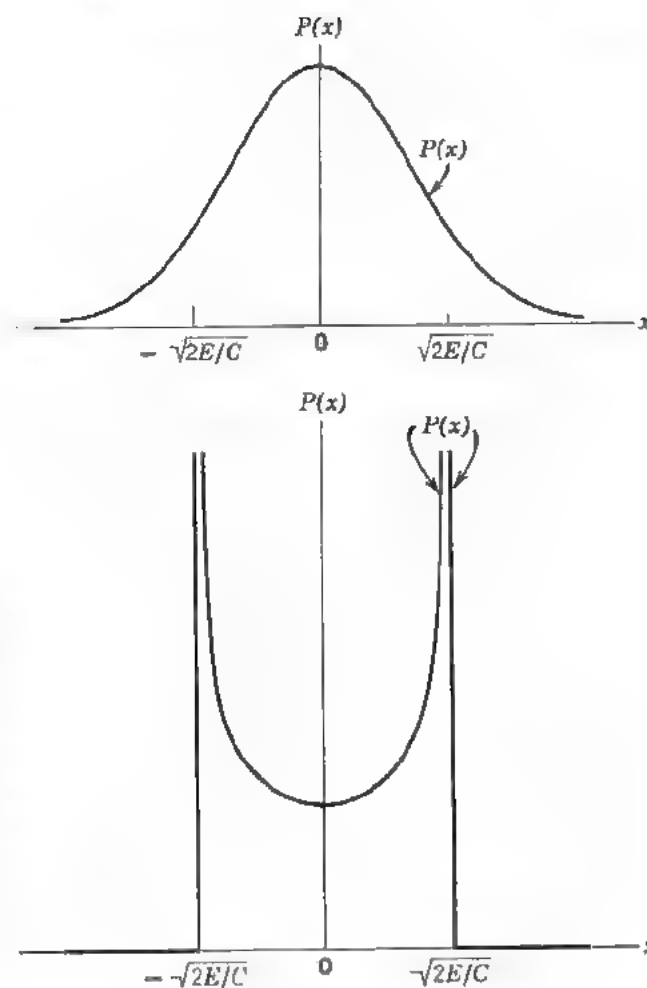
Por tanto la densidad de probabilidad es (ver el apéndice E para la evaluación de Ψ^*)

$$P = \Psi^*\Psi = Ae^{-(\sqrt{Cm/2\hbar})x^2}e^{+(i/2)\sqrt{C/m}t}Ae^{-(\sqrt{Cm/2\hbar})x^2}e^{-(i/2)\sqrt{C/m}t}$$

$$P = A^2e^{-(\sqrt{Cm/2\hbar})x^2}$$

Obsérvese que la densidad de probabilidad es independiente del tiempo a pesar de que la función de onda depende del tiempo. Posteriormente se verá que esto es cierto en cualquier caso en el cual la partícula asociada con la función de onda está en un solo estado de energía. En la parte superior de la figura 5-3 se representa por la curva continua a la densidad de probabilidad P predicha por la mecánica cuántica. La probabilidad de que una medición de la localización de la partícula oscilante ocurra en un elemento del eje x entre x y $x + dx$ es igual a $P dx$.

Puesto que P tiene un máximo en $x = 0$, punto de equilibrio del oscilador, la mecánica cuántica predice que es más probable encontrar a la partícula en un elemento dx localizado en el punto de equilibrio. Alejándose en cualquier dirección de esta localización, la probabilidad de encontrar la partícula en un elemento de la misma longitud dx decrece muy rápidamente, pero no existen límites bien definidos más allá de los cuales la probabilidad de encontrar a la partícula en un elemento del eje x sea precisamente cero.

**FIGURA 5-3**

Arriba: Densidad de probabilidad mecánico-cuántica y *Abajo:* Densidad de probabilidad clásica. Ambas para una partícula en el estado de energía más bajo de un oscilador armónico simple. La densidad de probabilidad mecánico-cuántica tiene sus picos cerca del punto de equilibrio y se extiende más allá de los límites del movimiento predicho por la física clásica. La densidad de probabilidad clásica es inversamente proporcional a la velocidad clásica y es mayor en los puntos extremos del movimiento, donde la velocidad se anula.

En el ejemplo siguiente se verá que estas predicciones son muy diferentes a las que se esperarían para la partícula oscilante según la mecánica clásica. ◀

Ejemplo 5-6. Evaluar las predicciones de la mecánica clásica para la densidad de probabilidad del oscilador armónico simple del ejemplo 5-5 y compararlas con las predicciones de la mecánica cuántica que se encontraron en ese ejemplo.

En la mecánica clásica la partícula oscilante tiene un impulso p definido y por lo tanto una velocidad v definida, para cualquier valor de su desplazamiento x medido desde la posición de equilibrio. La probabilidad de encontrarla en un elemento de longitud fijo sobre el eje x es proporcional al tiempo que la partícula invierte en ese elemento e inversamente proporcional a la velocidad con la cual pasa a través de él. Esto es

$$P = \frac{B^2}{v}$$

donde B^2 es alguna constante. Considerando la ecuación de la energía es fácil obtener una expresión para v en términos de x

$$E = K + V = \frac{mv^2}{2} + \frac{Cx^2}{2}$$

donde E , K y V son las energías total, cinética y potencial respectivamente y donde la energía potencial se ha evaluado en términos de x y de la constante de fuerza C del oscilador partiendo de una ecuación que se justificó en el ejemplo (5-3). Entonces se tiene

$$\frac{mv^2}{2} = E - \frac{Cx^2}{2}$$

$$v = \sqrt{\frac{2}{m}} \sqrt{E - \frac{Cx^2}{2}}$$

de modo que

$$P = \frac{B^2}{\sqrt{\frac{2}{m}} \sqrt{E - \frac{Cx^2}{2}}}$$

Esta expresión para la densidad de probabilidad clásica P se representa por la curva de la parte baja de la figura 5-3. Esta curva tiene un valor mínimo en el punto de equilibrio $x = 0$ y crece rápidamente en la proximidad de los límites de la oscilación, los cuales ocurren para valores de x en los que la partícula no tiene energía cinética y por lo tanto la energía potencial es igual a su energía total

$$E = \frac{Cx^2}{2}$$

$$x = \pm \sqrt{\frac{2E}{C}}$$

Por supuesto, la densidad de probabilidad clásica cae bruscamente a cero fuera de los límites del movimiento de la partícula, lo cual se indica en la figura mediante las líneas rectas. De manera más simple, la probabilidad de encontrar a la partícula clásica oscilante en un elemento de longitud dada del eje x es menor en la proximidad del punto de equilibrio, región en la cual la partícula invierte menos tiempo, y crece rápidamente en la proximidad de los límites de su movimiento, en donde se demora.

El valor de la constante B^2 que aparece en la expresión para la densidad de probabilidad clásica, se puede determinar imponiendo el requisito de que la probabilidad total de encontrar a la partícula en *algún lugar* debe ser igual a uno. La probabilidad total es justamente la integral de P sobre todas las x , así que se puede utilizar la expresión

$$\int_{-\infty}^{\infty} P dx = \frac{B^2}{\sqrt{2/m}} \int_{-\sqrt{2E/C}}^{+\sqrt{2E/C}} \frac{dx}{\sqrt{E - Cx^2/2}} = 1$$

No nos molestaremos en desarrollar el llamado procedimiento de normalización para la densidad de probabilidad clásica, no obstante que no es difícil una vez que se ha expresado E en términos de C ; pero se hará en el ejemplo 5-7 para determinar el valor de la constante A^2 correspondiente, que ocurre en la densidad de probabilidad mecánico-cuántica.

La figura 5-3 muestra que la predicción clásica para la densidad de probabilidad es muy diferente de la predicción de la mecánica cuántica. Según la mecánica clásica las mediciones de la localización de la partícula en el oscilador armónico simple lo encontrarán siempre dentro de dos límites bien definidos, los cuales por lo general se encontrarán cerca de uno o del otro de estos límites. Según la mecánica cuántica, cuando el oscilador armónico simple está en el estado de energía más bajo las mediciones encontrarán a la partícula por lo general cerca del punto de equilibrio, pero no existen límites bien definidos más allá de los cuales sea imposible encontrar la partícula.

Cuando el oscilador esté en su estado de energía más bajo, se estará muy lejos del intervalo de validez de la física clásica y por lo tanto, se espera que, de las dos predicciones, la hecha por la mecánica cuántica sea correcta. Como se verá en el capítulo 12, esto se puede confirmar midiendo las propiedades de las moléculas atómicas que dependen del espaciamiento interatómico, ya que en los estados de energía bajo los dos átomos de la molécula sienten la fuerza restauradora lineal característica del movimiento armónico simple. Por supuesto, el problema con el cálculo clásico es que éste ignora el principio de incertidumbre al asociar un valor definido a la velocidad o impulso de la partícula con un valor definido de su posición. En el

ejemplo 5-12 se hará una comparación entre las predicciones clásica y cuántica de la función densidad de probabilidad para una partícula en un estado de energía alto de un oscilador armónico simple, donde se está más próximo a la región de validez de la física clásica, ya que el principio de incertidumbre no es de consecuencias. Así se encontrará que las predicciones de las dos teorías son muy similares, como cabría esperar del principio de correspondencia. ◀

En el ejemplo 5-5 se vio una de las predicciones de la mecánica cuántica que concierne al comportamiento de una partícula en un oscilador armónico simple. La predicción es típica del tipo de información que puede proporcionar la teoría, la cual no puede decir que una partícula con un estado de energía dado se encontrará en una localización precisa a cierto tiempo, sino solamente las probabilidades relativas de que la partícula se encuentre en varias localizaciones en ese instante. Las predicciones de la mecánica cuántica son estadísticas.

El principio de incertidumbre provee la razón fundamental por la cual la mecánica cuántica misma se expresa en probabilidades y no en certidumbres. Por ejemplo, considérese que se investiga un oscilador armónico en algún estado de energía típico. Para conocer realmente que el sistema está en un estado particular se deberá hacer una medición de su energía. La medición necesariamente perturba al sistema en una forma que no se puede determinar por completo, de modo que no es sorprendente que no se pueda predecir con certeza dónde se encontrará la partícula cuando se haga la medición de la posición. En la mecánica clásica, a pesar de que la energía del sistema es microscópico, se puede hacer una medición de la energía además de otras mediciones sin perturbar al sistema. Así, la mecánica clásica afirma que se puede predecir con precisión si se desea, dónde se encontrará la partícula en una medición subsecuente. Pero cuando se aplica la mecánica clásica a un sistema microscópico es incorrecta. De la mecánica clásica no sólo es imposible predecir con precisión dónde estará una partícula de un sistema microscópico en una medición subsecuente, sino que como se vio en el ejemplo 5-6 también es imposible predecir con precisión las probabilidades relativas de encontrar a la partícula en varias localizaciones. La mecánica cuántica permite hacer predicciones precisas acerca de estas probabilidades relativas, debido a que toma en cuenta de manera cuantitativa el hecho fundamental de la vida del mundo microscópico: el principio de incertidumbre.

Born expresó la situación como sigue:

"Describimos el estado instantáneo del sistema por una cantidad Ψ , que satisface una ecuación diferencial y por lo tanto cambia con el tiempo, de una manera que está completamente determinada por su forma en el instante $t = 0$, por lo tanto su comportamiento es rigurosamente causal. Sin embargo, puesto que el significado físico se encuentra en la cantidad $\Psi^* \Psi$, y otras expresiones cuadráticas construidas de manera similar, las cuales Ψ , solamente define parcialmente, se sigue que, aun cuando las cantidades físicamente determinables se conocen completamente al tiempo $t = 0$, el valor inicial de la función Ψ está necesariamente indefinido. Esta visión de las cosas es equivalente a afirmar que los eventos suceden en realidad en una forma estrictamente causal, pero que nosotros no conocemos con exactitud el estado inicial. En este sentido la ley de causalidad es inútil; la física está en la naturaleza de lo indeterminado y por lo tanto sujeta a la estadística".

La primera observación que hace Born acerca de que la dependencia espacial de Ψ para algún instante inicial es suficiente para determinar completamente su dependencia espacial para cualquier instante posterior, es una consecuencia del hecho de que Ψ satisface la ecuación de Schrödinger la cual solamente contiene una primera derivada temporal.

Su segunda observación, acerca de la imposibilidad de definir completamente la dependencia espacial de la función de onda en el tiempo inicial se puede ver analizando (5-25a) (5-26) que muestra que si se conoce una densidad de probabilidad a partir de un conjunto inicial de mediciones sobre un sistema, no es posible determinar de manera unívoca una función de onda inicial asociada con el sistema. Todo lo que se puede determinar es la suma de los cuadrados de las partes real e imaginaria de la función de onda.

Las ideas de los últimos párrafos se pueden resumir diciendo que el comportamiento de una función de onda dada en un sistema, es predecible en el sentido de que la ecuación de

Schrödinger para la energía potencial correspondiente determinará exactamente su forma para algún instante posterior en términos de su forma en un instante inicial; *pero* su forma inicial no es posible determinarla completamente mediante un conjunto inicial de medidas y su forma final predice solamente las probabilidades relativas de los resultados del conjunto final de medidas. Citando nuevamente a Born: "El movimiento de partículas se realiza conforme a las leyes de la probabilidad, pero la probabilidad misma se propaga de acuerdo con la ley de causalidad".

Ejemplo 5-7. Normalizar la función de onda del ejemplo 5-3 determinando el valor de la constante arbitraria A para el cual la probabilidad total de encontrar a la partícula asociada, en algún lugar sobre el eje x , es igual a uno.

Si la partícula existe, la probabilidad total de encontrar a la partícula en *algún lugar* sobre todo el eje x es necesariamente igual a uno. Esta probabilidad total se puede obtener matemáticamente integrando la función densidad de probabilidad P sobre toda x . Haciendo esto e igualando el resultado a uno se obtiene

$$\int_{-\infty}^{\infty} P dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi dx = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\sqrt{Cm}/\hbar)x^2} dx = 1$$

Ya que el integrando $e^{-(\sqrt{Cm}/\hbar)x^2}$ depende de x^2 será una *función par* de x . Esto es, su valor para cierta x es igual a su valor *para* $-x$, tal como se puede ver en la figura 5-4. Por lo tanto la contribución al valor total de la integral que se obtiene en el intervalo $-\infty$ a 0 es igual a la contribución que se obtiene en el intervalo de 0 a $+\infty$, y se tiene

$$A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\sqrt{Cm}/\hbar)x^2} dx = 2A^2 \int_0^{\infty} e^{-(\sqrt{Cm}/\hbar)x^2} dx = 1$$

La integral definida se puede evaluar consultando las tablas apropiadas y resulta en

$$\int_0^{\infty} e^{-(\sqrt{Cm}/\hbar)x^2} dx = \frac{(\pi\hbar)^{1/2}}{2(Cm)^{1/4}}$$

Entonces inmediatamente se encuentra que el valor requerido para A es

$$A = \frac{(Cm)^{1/8}}{(\pi\hbar)^{1/4}}$$

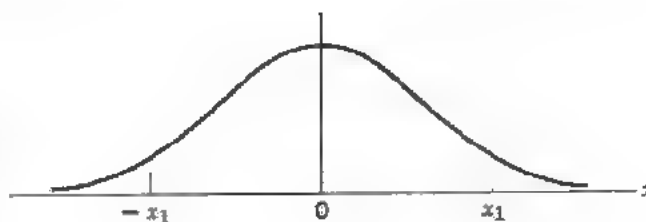
Con este valor de A la función de onda resulta

$$\Psi(x, t) = \frac{(Cm)^{1/8}}{(\pi\hbar)^{1/4}} e^{-(\sqrt{Cm}/2\hbar)x^2} e^{-(i/2)\sqrt{Cm}t}$$

Al procedimiento seguido en el ejemplo 5-7 se le denomina *normalización* de una función de onda y se dice que la función de onda que aparece al final del ejemplo está *normalizada*. Antes de

FIGURA 5-4

Gráfica de la función *par* $e^{-(\sqrt{Cm}/\hbar)x^2}$. Puesto que la función depende de x^2 , su valor para cualquier x , particular, es igual a su valor para $-x$.



que se siga el procedimiento, la amplitud de la función de onda es arbitraria debido a que la linealidad de la ecuación de Schrödinger permite que una función de onda sea multiplicada por una constante de magnitud arbitraria y continúe siendo una solución a la ecuación. La normalización tiene el efecto de fijar la amplitud al fijar el valor de la constante multiplicativa, la A en el ejemplo 5-7. No siempre es necesario efectuar los cálculos para encontrar el valor de la constante de amplitud, debido a que es posible obtener resultados útiles en términos de las probabilidades relativas que son independientes de los valores específicos de las amplitudes. Pero siempre habrá de recordarse que

$$\int_{-\infty}^{\infty} P \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi \, dx = 1 \quad (5-27)$$

ya que estas integrales dan la probabilidad total de encontrar a la partícula descrita por la función de onda en alguna parte, y la probabilidad deberá ser igual a uno si la partícula existe.

5.4 Valores de expectación

En la sección anterior se vio que la función de onda contiene información acerca del comportamiento de la partícula asociada y que especifica la densidad de probabilidad para la partícula. En esta sección se verá la manera de extraer de la función de onda una amplia variedad de información adicional acerca de la partícula. Esto es, se aprenderá la manera de obtener información numérica detallada a partir de la función de onda y no solamente acerca de la posición de la partícula sino también acerca de su impulso, energía y todas las otras cantidades que caracterizan su comportamiento. Por ejemplo, se verá la manera de dar una evaluación cuantitativa de los términos Δx y Δp en el principio de incertidumbre. Las funciones de onda son útiles ya que contienen bastante información acerca del comportamiento de la partícula asociada.

Considérese a una partícula y a su función de onda asociada $\Psi(x, t)$. En una medición de la posición de la partícula en el sistema descrito por la función de onda, existirá una probabilidad finita de encontrarla en cualquier coordenada x en el intervalo de x a $x + dx$ siempre que la función de onda no sea cero en este intervalo. En general la función de onda no es cero sobre una región extensa del eje x , por lo tanto, generalmente no somos capaces de establecer que la coordenada x de la partícula tiene cierto valor definido. Sin embargo, es posible especificar algún tipo de posición *promedio* para la partícula de la manera siguiente: imagine que se hace una medición de la posición de la partícula en el instante t . La probabilidad de encontrarla entre x y $x + dx$, de acuerdo con el postulado de Born, (5-24)

$$P(x, t) \, dx = \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) \, dx$$

Imagine que estas mediciones se realizan cierto número de veces sobre sistemas idénticos descritos por la misma función de onda $\Psi(x, t)$, y siempre para el mismo valor de t , registrando los valores de x en los cuales se encontró la partícula. Un ejemplo sería un conjunto de mediciones de las coordenadas x de las partículas en los estados de menor energía de osciladores armónicos simples idénticos. En tres dimensiones, un ejemplo sería un conjunto de mediciones de las posiciones de los electrones en átomos de hidrógeno con todos los átomos en sus estados de menor energía. Se puede utilizar el promedio de los valores observados para caracterizar la posición de una partícula asociada con la función de onda $\Psi(x, t)$ para el tiempo t . Este valor promedio se le denominará *valor de expectación* de la coordenada x de la partícula al instante t . Es fácil ver que el valor de expectación de x , que se escribe \bar{x} estará dado por

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} x P(x, t) \, dx$$

La razón es que el integrando en esta expresión es justamente el valor de la coordenada x pesado por la probabilidad de observar dicho valor. Por lo tanto se obtiene integrando el promedio de los valores observados. Utilizando el postulado de Born para evaluar la densidad de probabilidad en términos de la función de onda, se obtiene

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)x\Psi(x,t) dx \quad (5-28)$$

Los términos del integrando están escritos en el orden mostrado para preservar la simetría con una notación que se introducirá más tarde.

Algunos estudiantes encontrarán más familiares estas ecuaciones si se escriben en la forma

$$\bar{x} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} xP(x,t) dx}{\int_{-\infty}^{\infty} P(x,t) dx} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)x\Psi(x,t) dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t)\Psi(x,t) dx}$$

pero son realmente equivalentes a la forma que se utilizó, ya que (5-27) muestra que los denominadores son iguales a uno.

Ejemplo 5-8. Determinar \bar{x} para una partícula en el estado de energía más bajo de un oscilador armónico simple, utilizando la función de onda y la densidad de probabilidad que se consideró en los ejemplos anteriores.

De las figuras 5-3 y 5-4 inmediatamente se ve que $\bar{x} = 0$. La razón es que \bar{x} es el valor promedio de x , con el promedio calculado utilizando un factor de peso $\Psi^*\Psi$ que es simétrico alrededor de $x = 0$; para cualquier oportunidad de observar cierto valor positivo de x existe exactamente la misma oportunidad de observar un valor de x negativo de la misma magnitud. El comportamiento de la partícula en el oscilador es simétrico alrededor de su punto de equilibrio en $x = 0$, así $\bar{x} = 0$.

De manera más formal, se tiene

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x \Psi dx$$

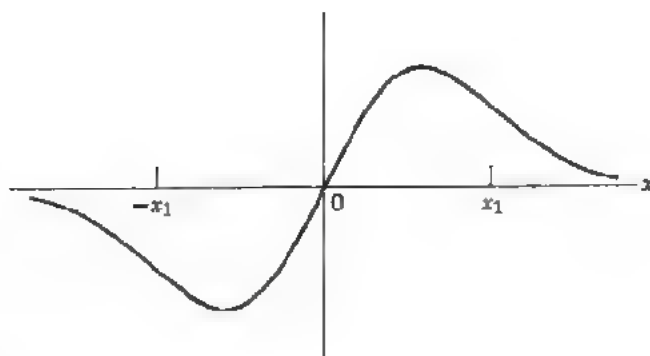


FIGURA 5-5

Gráfica de la función impar $x e^{-(\sqrt{Cm}/\hbar)x^2}$. El valor de la función para cualquier x_1 particular es igual al negativo de su valor para $-x_1$.

donde el factor $\Psi^*\Psi$ en el integrando está representado en las figuras 5-3 y 5-4. Ahora, este factor es una función par de x y el factor restante en el integrando es x misma que es una función impar de x . Así, el integrando completo es una *función impar* de x . Esto es, su valor para una x particular es exactamente igual al negativo de su valor en $-x$ tal como se ilustra en la figura 5-5. De esto se sigue que la integral será cero ya que para cualquier contribución a su valor total, obtenida de un elemento del eje x en alguna x , existe una contribución del signo opuesto que la compensa, proveniente del elemento correspondiente en $-x$.

A partir de argumentos que utilizan un sistema coordenado en el cual el origen del eje x se escoge en el punto de equilibrio del oscilador, se concluye que \bar{x} está en el punto de equilibrio, tal como se indica en la figura (5-6a); pero esta conclusión es cierta independientemente de la elección del origen. Esto es, si el punto de equilibrio del oscilador está localizado a la derecha del origen, $\Psi^*\Psi$ se encuentra centrada en la posición de equilibrio, de modo que \bar{x} está localizada en tal punto, como se indica en la figura 5-6b. La razón es que el comportamiento del oscilador es simétrico alrededor de su punto de equilibrio. Si se perturba al oscilador haciendo que la fuerza de restitución sea más intensa en una dirección que en la otra, esta simetría se destruye (Este ya no seguiría siendo un oscilador armónico simple). Por lo tanto $\Psi^*\Psi$ perderá su simetría y \bar{x} se desplazará del punto de equilibrio. En las figuras (5-6c) y (5-6d) se muestran ejemplos.

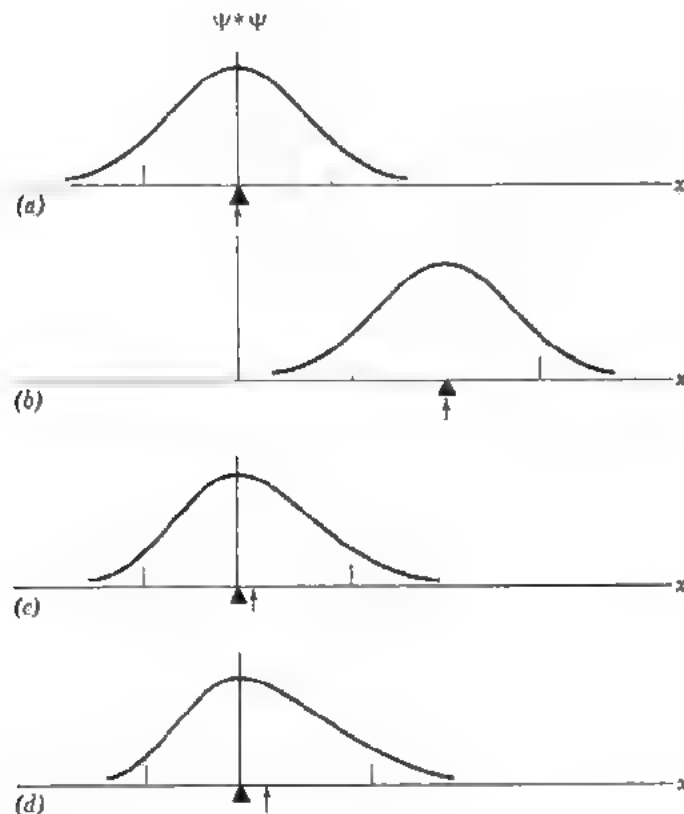


FIGURA 5-6

(a) Densidad de probabilidad para el estado base de un oscilador armónico cuyo punto de equilibrio (marcado por un triángulo) está en el origen. El valor de expectación \bar{x} (marcado por una flecha) también está en el origen. (b) El oscilador está desplazado a lo largo del eje x , pero el valor de expectación \bar{x} permanece coincidiendo con el punto de equilibrio. (c) La fuerza restauradora es más débil para desplazamientos positivos que para desplazamientos negativos, destruyendo la simetría del oscilador. Ahora es más probable encontrar a la partícula a la derecha que a la izquierda del punto de equilibrio, así que el valor de expectación \bar{x} está ahora a la derecha del punto de equilibrio, pero éste se encuentra en el lugar en el que es más probable encontrar la partícula ya que en ese sitio la densidad de probabilidad es máxima. (d) Conforme la fuerza restauradora se hace más asimétrica, \bar{x} está más desplazada a la derecha. En todas las figuras, las marquitas verticales sobre el eje x indican los límites de la oscilación clásica para el potencial apropiado, o para la fuerza y para la energía total.

Es evidente que una expresión de la misma forma que (5-28) sería apropiada para la evaluación del valor de expectación de cualquier función de x . Esto es

$$\overline{x^2} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) x^2 \Psi(x,t) dx$$

$$\overline{f(x)} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) f(x) \Psi(x,t) dx$$

donde $f(x)$ es cualquier función de x . Aún para una función que puede depender explícitamente del tiempo, tal como una energía potencial $V(x,t)$, se puede escribir

$$\overline{V(x,t)} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) V(x,t) \Psi(x,t) dx \quad (5-29)$$

ya que todas las mediciones hechas para evaluar $V(x,t)$ se hacen para el mismo valor de t y por lo tanto los argumentos anteriores siguen siendo válidos.

La coordenada x y la energía potencial $V(x,t)$ son dos ejemplos de las *cantidades dinámicas* que se pueden utilizar para caracterizar el comportamiento de la partícula. Ejemplos de otras cantidades dinámicas son el impulso p y la energía total E . Los valores de expectación de estas cantidades están dados siempre por el mismo tipo de expresión. Por ejemplo, el valor de expectación del impulso está dado por

$$\overline{p} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) p \Psi(x,t) dx \quad (5-30)$$

Sin embargo, para evaluar la integral en (5-30) se deberá expresar el integrando $\Psi^*(x,t)p\Psi(x,t)$ como una función de las variables x y t . En la mecánica clásica siempre se puede escribir p como una función de las variables x y/o t . Por ejemplo, para una partícula que se mueve en un potencial independiente del tiempo, p se puede escribir como una función sólo de x ya que su impulso se conoce con precisión para cualquier punto de su trayectoria (después de haberse resuelto el problema). Una consideración momentánea sobre el comportamiento de un oscilador armónico simple clásico verificará esto. Pero en la mecánica cuántica el principio de incertidumbre establece que no es posible escribir p como una función de x , ya que p y x no pueden conocerse simultáneamente con completa precisión. Tampoco es posible escribir p como función de t . Se habrá de encontrar alguna otra forma de expresar el integrando de (5-30) en términos de x y t .

Se puede encontrar un indicio considerando la función de onda de la partícula libre (5-23) que es

$$\Psi(x,t) = \cos(kx - \omega t) + i \sin(kx - \omega t)$$

Diferenciando respecto a x se tiene

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x} &= -k \sin(kx - \omega t) + ik \cos(kx - \omega t) \\ &= ik[\cos(kx - \omega t) + i \sin(kx - \omega t)] \end{aligned}$$

Y como $k = p/\hbar$, entonces,

$$\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x} = i \frac{p}{\hbar} \Psi(x,t)$$

que se puede escribir

$$p[\Psi(x,t)] = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} [\Psi(x,t)]$$

Lo cual indica que existe una asociación entre la cantidad dinámica p y el *operador diferencial* $-i\hbar(\partial/\partial x)$. Esto es, el efecto de multiplicar la función $\Psi(x,t)$ por p es el mismo que el efecto de operar sobre ella con el operador diferencial $-i\hbar(\partial/\partial x)$ (esto es, tomar $-i\hbar$ veces la derivada parcial de la función respecto a x).

Se puede encontrar una asociación similar entre la cantidad dinámica E y el operador diferencial $i\hbar(\partial/\partial t)$ diferenciando la función de onda de la partícula libre $\Psi(x,t)$ respecto a t . Se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} &= +\omega \sin(kx - \omega t) - i\omega \cos(kx - \omega t) \\ &= -i\omega [\cos(kx - \omega t) + i \sin(kx - \omega t)] \end{aligned}$$

Como $\omega = E/\hbar$, esto se puede escribir

$$E[\Psi(x,t)] = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [\Psi(x,t)]$$

¿Estas relaciones están restringidas al caso de funciones de onda de partícula libre? ¡No! Considérese (5-9) que relaciona la energía total E con el impulso p y la energía potencial $V(x,t)$

$$\frac{p^2}{2m} + V(x,t) = E$$

Al substituir las cantidades dinámicas p y E por sus diferentes operadores diferenciales asociados, se tiene

$$\frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 + V(x,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

Y ya que $(-i\hbar)^2 = -\hbar^2$, y $(\partial/\partial x)^2 = (\partial/\partial x)(\partial/\partial x) = \partial^2/\partial x^2$, se obtiene

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (5-31)$$

Que es una *ecuación de operadores*. Tiene significado cuando se la aplica a cualquier función de onda $\Psi(x,t)$, en el sentido de que se obtienen resultados idénticos después de efectuar las operaciones indicadas en cada uno de los lados de la ecuación. Es decir, (5-31) implica

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}$$

donde $\Psi(x,t)$ es cualquier función de onda. Por supuesto, que esta es justamente la ecuación de Schrödinger. Por lo tanto, se concluye que postulando las asociaciones

$$p \leftrightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad \text{y} \quad E \leftrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (5-32)$$

es equivalente a postular la ecuación de Schrodinger. La validez de estas asociaciones es ilimitada.

El procedimiento utilizado en el último párrafo es esencialmente el original seguido por Schrodinger para obtener su ecuación. Este procedimiento proporciona un método poderoso para obtener la ecuación de onda mecánico-cuántica para casos más complicados que el de una sola partícula en una sola dimensión y que se trató en este capítulo. Posteriormente se utilizará este procedimiento para tratar los sistemas que interesan.

Utilizando la primera de estas asociaciones de operadores para obtener una expresión integrable para el valor de expectación del impulso. Tomando (5-30) que es

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) p \Psi(x,t) dx$$

y substituyendo p en el integrando por $-i\hbar(\partial/\partial x)$. Se obtiene

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(x,t) dx$$

o

$$\bar{p} = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x} dx \quad (5-33)$$

que es una expresión integrable de inmediato si se conoce $\Psi(x,t)$.

En este punto se puede ver la razón para ordenar los términos en los integrandos de (5-30) y (5-33). No tendría sentido tener

$$\bar{p} = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) \Psi(x,t) \frac{\partial}{\partial x} dx$$

como tampoco

$$\begin{aligned} \bar{p} &= -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x} [\Psi^*(x,t) \Psi(x,t)] dx \\ &= -i\hbar [\Psi^*(x,t) \Psi(x,t)]_{-\infty}^{\infty} \end{aligned}$$

ya que el miembro derecho de la última ecuación es siempre igual a cero. Esto es cierto ya que en cualquier situación real la partícula nunca se encontraría ni en $x = +\infty$ ó $x = -\infty$, y por lo tanto la densidad de probabilidad se anula en ambos límites. También debe mencionarse que utilizar la expresión

$$\bar{p} = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x,t) \frac{\partial \Psi^*(x,t)}{\partial x} dx$$

es equivalente a utilizar el signo menos en (5-19) lo cual no añade nada nuevo a la teoría..

El ordenamiento de los términos no es de consecuencia en los integrandos que ocurren en las expresiones para los valores de expectación de cantidades que son funciones de la posición y/o del tiempo, tales como (5-28) y (5-29) ya que no existen derivadas involucradas. Sin embargo, es una convención el utilizar el mismo orden que el requerido por las expresiones del valor de expectación del impulso.

La segunda de las expresiones de asociación de operadores (5-32) se puede evaluar utilizando el valor de expectación de la energía total E de una partícula en un estado descrito por la función de onda $\Psi(x,t)$, de la manera siguiente

$$\begin{aligned}\bar{E} &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) E \Psi(x,t) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \Psi(x,t) dx \\ &= i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} dx\end{aligned}$$

Pero obsérvese que también se puede utilizar la ecuación de la energía (5-9) para escribir E en términos de p y $V(x, t)$ y a continuación emplear la primera de las asociaciones (5-32) para convertir p en un operador, obteniéndose

$$\bar{E} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t) \right) \Psi(x,t) dx$$

De hecho, el valor de expectación de cualquier cantidad dinámica se puede obtener utilizando sólo la primera de las asociaciones de operadores (5-32). Esto es, si $f(x, p, t)$ es cualquier cantidad dinámica que es función de x, p y posiblemente de t , útil para describir el estado de movimiento de la partícula asociada con la función de onda $\Psi(x,t)$, entonces su valor de expectación $\overline{f(x,p,t)}$ está dado por

$$\overline{f(x,p,t)} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) f_{\text{op}} \left(x, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, t \right) \Psi(x,t) dx \quad (5-34)$$

donde el operador $f_{\text{op}}(x, -i\hbar \partial/\partial x, t)$ se obtiene a partir de la función $f(x, p, t)$ simplemente substituyendo p por $-i\hbar \partial/\partial x$.

Se ha encontrado que la función de onda $\Psi(x,t)$ contiene más información que la sola densidad de probabilidad $P(x,t) = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)$. La función de onda también contiene, a través de (5-34), el valor de expectación de la coordenada x , la energía potencial V , el impulso p , la energía total E y en general el valor de expectación de cualquier cantidad dinámica $f(x,p,t)$. De hecho, la función de onda contiene toda la información que el principio de incertidumbre provee para conocer de la partícula asociada.

Ejemplo 5-9. Considere una partícula de masa m que se puede mover libremente a lo largo del eje x desde $x = -a/2$ hasta $x = +a/2$, pero que le está estrictamente prohibido encontrarse fuera de esta región. La partícula rebota hacia adelante y hacia atrás entre las paredes en $x = \pm a/2$ de una caja unidimensional. Se supone que las paredes son completamente impenetrables sin importar cuán energética sea la partícula. Por supuesto que esta suposición es una idealización pero que resulta sumamente útil. En el siguiente capítulo se estudiará este problema y se encontrará que la función de onda para el estado de energía más bajo es

$$\Psi(x,t) = \begin{cases} A \cos \frac{\pi x}{a} e^{-iEt/\hbar} & -a/2 < x < +a/2 \\ 0 & x \leq -a/2 \text{ o } x \geq +a/2 \end{cases}$$

donde A es una constante real arbitraria y E es la energía total de la partícula. Esta función de onda es otra de las que resulta ilustrativo utilizar en este capítulo. Justificar su utilización verificando que es una solución a la ecuación de Schrödinger en la región $-a/2 < x < +a/2$, determinar el valor de E para el estado de energía más baja.

Si en la región en cuestión no hay fuerzas que actúen sobre la partícula, la función energía potencial será constante en la región. Como la energía potencial siempre está definida hasta una constante aditiva, se puede tomar como cero el valor de la energía potencial en la región. La ecuación de Schrödinger en la región es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad -a/2 < x < +a/2$$

Se verifica la función de onda substituyendo sus derivadas en la ecuación. Con

$$\Psi = A \cos \frac{\pi x}{a} e^{-iEt/\hbar}$$

se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi}{\partial x} &= -\left(\frac{\pi}{a}\right) A \operatorname{sen} \frac{\pi x}{a} e^{-iEt/\hbar} \\ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} &= -\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 A \cos \frac{\pi x}{a} e^{-iEt/\hbar} = -\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 \Psi \end{aligned}$$

y

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar} A \cos \frac{\pi x}{a} e^{-iEt/\hbar} = -\frac{iE}{\hbar} \Psi$$

La substitución produce

$$+\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{a^2} \Psi = -i\hbar \frac{iE}{\hbar} \Psi$$

o

$$\frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \Psi = E \Psi$$

Que se satisface idénticamente si E tiene el valor

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

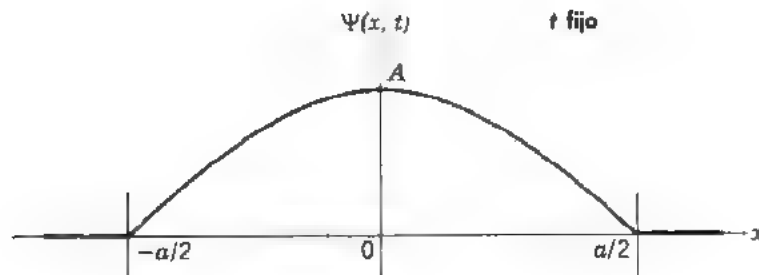


FIGURA 5-7

Dependencia en x de una función de onda para el estado de energía más bajo de una partícula confinada estrictamente a una región de longitud a pero que se mueve libremente en ella. En cualquier parte fuera de la región el valor de la función de onda es cero.

Entonces, se ha determinado el valor requerido para E que corresponde a la función de onda que nos interesa y también se ha verificado que la función de onda es la solución de la ecuación de Schrödinger

La figura 5-7 ilustra la función de onda mediante una gráfica de su dependencia espacial. Observe que los valores de $\Psi(x,t)$ en el interior de la caja ajustan con los valores externos (en el exterior de la caja) nulos en las fronteras de la región en $x = -a/2$ y $x = +a/2$ (paredes de la caja) debido a que la función coseno se aproxima a cero cuando x se aproxima a $\pm a/2$. Por supuesto que los valores externos de $\Psi(x,t)$ son cero debido a que la función de onda describe una partícula que tiene estrictamente prohibido el estar fuera de la región. ◀

Ejemplo 5-10. Utilice la función de onda de la "partícula en una caja" que se trató en el Ejemplo 5-9 para evaluar los valores de expectación de x , p , x^2 y p^2 para la partícula asociada con la función de onda.

Para evaluar x , deberá evaluarse

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x \Psi dx$$

Utilizando la función de onda del ejemplo 5-9 se tiene

$$\begin{aligned} \bar{x} &= \int_{-a/2}^{+a/2} A \cos \frac{\pi x}{a} e^{+iEt/\hbar} x A \cos \frac{\pi x}{a} e^{-iEt/\hbar} dx \\ &= A^2 \int_{-a/2}^{+a/2} x \cos^2 \frac{\pi x}{a} dx \end{aligned}$$

donde la integración se ha restringido a la región de $-a/2$ a $+a/2$ ya que $\Psi(x,t)$ es cero fuera de esta región. Ahora, observe que el integrando es un producto de $\cos^2(\pi x/a)$, que es una función par de x , multiplicando por x misma que es una función impar de x . Por lo tanto el integrando es una función impar de x . De esta conclusión se sigue que

$$\int_{-a/2}^{+a/2} x \cos^2 \frac{\pi x}{a} dx = 0$$

ya que la integral de un integrando que es una función impar de la variable de integración, es cero si la integración se toma sobre un intervalo centrado alrededor de su origen (ver ejemplo 5-8). Entonces se obtiene

$$\bar{x} = 0$$

Una revisión somera mostrará por qué las mediciones de la localización de la partícula que se mueve libremente entre $-a/2$ y $+a/2$ deberá esperarse que se promedie a cero.

Para evaluar p se evalúa

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* (-i\hbar) \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx$$

Utilizando la $\Psi(x,t)$, dada y su derivada respecto a x que se calculó en el ejemplo 5-9, se obtiene

$$\bar{p} = -i\hbar \int_{-a/2}^{+a/2} A \cos \frac{\pi x}{a} e^{+iEt/\hbar} \left(-\frac{\pi}{a} \right) A \sin \frac{\pi x}{a} e^{-iEt/\hbar} dx$$

■

$$\bar{p} = i\hbar \frac{\pi}{a} A^2 \int_{-a/2}^{+a/2} \cos \frac{\pi x}{a} \operatorname{sen} \frac{\pi x}{a} dx$$

Nuevamente el integrando es, en total, una función impar de la variable de integración ya que es el producto de una función par $\cos (\pi x/a)$ por una función impar $\operatorname{sen} (\pi x/a)$. Entonces se obtiene

$$\bar{p} = 0$$

ya que la integral se toma sobre un intervalo centrado en el origen y consecuentemente resulta cero. Físicamente el valor de expectación del impulso de la partícula es cero ya que si la partícula está confinada a la región $-a/2$ y $+a/2$ y se mueve con energía total E deberá rebotar hacia adelante y hacia atrás entre los extremos de la región e invertir constantemente el signo (es decir, la dirección) de su impulso. Esto es, la magnitud de su impulso deberá ser tal que $p^2/2m = E$, pero como es igualmente probable que el signo del impulso sea positivo o negativo, las mediciones de esta cantidad se promediarán a cero.

Para evaluar $\bar{x^2}$, se deberá evaluar la integral

$$\bar{x^2} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x^2 \Psi dx = \int_{-a/2}^{+a/2} A \cos \frac{\pi x}{a} e^{+iEt/\hbar} x^2 A \cos \frac{\pi x}{a} e^{-iEt/\hbar} dx = A^2 \int_{-a/2}^{+a/2} x^2 \cos^2 \frac{\pi x}{a} dx$$

Que no se hace cero debido a que el integrando es una función par de x . Por la misma razón es posible, como en el ejemplo 5-7, simplificar de inmediato la integral para obtener

$$\bar{x^2} = 2A^2 \int_0^{+a/2} x^2 \cos^2 \frac{\pi x}{a} dx$$

Si se multiplica y divide por y entre $(a/\pi)^3$, se puede escribir

$$\bar{x^2} = 2A^2 \left(\frac{a}{\pi}\right)^3 \int_0^{+\pi/2} \left(\frac{\pi x}{a}\right)^2 \cos^2 \frac{\pi x}{a} d\left(\frac{\pi x}{a}\right)$$

Integral que se puede evaluar consultando las tablas apropiadas obteniéndose

$$\bar{x^2} = A^2 \frac{a^3}{4\pi^2} \left(\frac{\pi^2}{6} - 1\right)$$

Para determinar completamente $\bar{x^2}$ se deberá también conocer el valor de la constante A que determina la amplitud de la función de onda. Como en el ejemplo 5-7, se puede encontrar el valor apropiado demandando la *normalización* de la función de onda. Esto es, ajustar A de modo que la probabilidad total de encontrar a la partícula en alguna parte es igual a uno. La condición produce

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi dx = A^2 \int_{-a/2}^{+a/2} \cos^2 \frac{\pi x}{a} dx = 2A^2 \frac{a}{\pi} \int_0^{+\pi/2} \cos^2 \frac{\pi x}{a} d\left(\frac{\pi x}{a}\right) = 1$$

Integrando se obtiene

$$2A^2 \frac{a}{\pi} \frac{\pi}{4} = 1$$

o

$$A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

Entonces se tiene

$$\overline{x^2} = \frac{2}{a} \frac{a^3}{4\pi^2} \left(\frac{\pi^2}{6} - 1 \right) = \frac{a^2}{2\pi^2} \left(\frac{\pi^2}{6} - 1 \right) = 0.033a^2$$

La cantidad $\overline{x^2}$ no es cero a pesar de que $\bar{x} = 0$, debido a que cualquier medición de x^2 deberá conducir necesariamente a un resultado positivo. Esta cantidad o su raíz cuadrada $\sqrt{\overline{x^2}}$ (la raíz media cuadrada de la posición) se puede tomar como una medición de las fluctuaciones alrededor del promedio $x = 0$, que debería observarse en las determinaciones de la posición de la partícula. La última cantidad tiene el valor

$$\sqrt{\overline{x^2}} = 0.18a$$

Las fluctuaciones surgen debido a que la partícula no siempre se encuentra en el mismo sitio, si no en varios de ellos, ya que es posible encontrarla siempre que $\Psi^*\Psi$ tenga un valor apreciable. (En este caso en el que $\bar{x} = 0$, la cantidad $\sqrt{\overline{x^2}}$ es una medida de las fluctuaciones. Comentarios análogos son aplicables al impulso p). De la misma manera, en el caso en el que $\bar{x} \neq 0$, la cantidad $\sqrt{\overline{x^2} - \bar{x}^2}$ es una medida de las fluctuaciones.

Por último, evaluando p^2 de la expresión

$$p^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* (-i\hbar)^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} dx = -\hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} dx$$

Utilizando el valor de $\partial^2 \Psi / \partial x^2$ calculado en el ejemplo 5-9, se tiene

$$\overline{p^2} = \hbar^2 \frac{\pi^2}{a^2} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi dx$$

Obviamente la integral es igual a uno, ya que esta es justamente la probabilidad de encontrar la partícula en algún sitio. Si estuviéramos interesados solamente en evaluar $\overline{p^2}$ no sería necesario realizar el proceso de normalización para evaluar A ya que se podría postular e inmediatamente concluir que

$$\overline{p^2} = \left(\frac{\hbar \pi}{a} \right)^2$$

La raíz cuadrada de esta cantidad (la raíz media cuadrática del impulso)

$$\sqrt{\overline{p^2}} = \frac{\hbar \pi}{a}$$

es una medida de las fluctuaciones alrededor del promedio, $\bar{p} = 0$, que debería observarse en la determinación del impulso de la partícula. Las fluctuaciones provienen, como se mencionó anteriormente, debido a que la partícula se encontrará en ocasiones con impulso $p = -\sqrt{2mE}$ en otras con impulso $p = +\sqrt{2mE}$. Si se calcula

$$p = \sqrt{2mE} = \sqrt{\frac{2m\pi^2\hbar^2}{2ma^2}} = \frac{\pi\hbar}{a}$$

del ejemplo 5-9, se observa que $\sqrt{\overline{p^2}}$ es justamente igual a la magnitud de p .

Si se define $\sqrt{x^2}$ y $\sqrt{p^2}$ como las incertidumbres Δx y Δp en la posición y el impulso de la partícula en el estado de energía que se ha venido tratando, se obtiene

$$\Delta x \Delta p = \sqrt{x^2} \sqrt{p^2} = 0.18a \frac{\pi \hbar}{a} = 0.57 \hbar$$

Que es en efecto consistente con el límite inferior $\hbar/2$ que establece el principio de incertidumbre. Obsérvese que esta es la primera vez que se ha hecho un cálculo cuantitativo al referirnos al principio de incertidumbre. Los valores de expectación calculados a partir de las funciones de onda hacen posible dar definiciones cuantitativas a las incertidumbres. ◀

5.5 La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

La utilidad de las funciones de onda justifica con mucho el trabajo requerido para obtenerlas. Esto se hace resolviendo la ecuación de Schrödinger (5-22)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t) \Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}$$

utilizando la función energía potencial $V(x, t)$ que describe con propiedad las fuerzas que actúan sobre la partícula que nos interesa. Ahora, se dará el primer paso para resolver esta ecuación diferencial parcial. Como se prometió, se desarrollará cuidadosamente los procesos matemáticos necesarios suponiendo que no existe conocimiento previo de las ecuaciones diferenciales por parte del estudiante.

La técnica usual para resolver ecuaciones diferenciales parciales consiste en buscar las soluciones en la forma de productos de funciones cada una de las cuales contiene sólo una de las variables independientes que aparecen en la ecuación. Esta técnica, llamada *separación de variables*, se utiliza debido a que de inmediato reduce la ecuación diferencial parcial a un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias. Como se verá, esta es una simplificación considerable. Se está tratando aquí con una ecuación diferencial parcial que contiene una sola variable espacial x más la variable tiempo t . Entonces la técnica consiste en buscar soluciones en las cuales la función de onda $\Psi(x,t)$ se pueda escribir como el producto

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\varphi(t) \quad (5-35)$$

donde el primer término del segundo miembro es una función únicamente de x y el segundo lo es sólo de t . Se supondrá la existencia de soluciones de esta forma, se substituirá estas soluciones en la ecuación de Schrödinger que supuestamente satisfacen y se verá qué sucede. Si nuestra suposición no es válida, se sabrá de inmediato. Sin embargo, se encontrará que las soluciones de la forma supuesta realmente existen, *siempre que la energía potencial no dependa explícitamente del tiempo t* , de modo que la función se pueda escribir $V(x)$. Puesto que en la mecánica cuántica, así como en la clásica casi todos los sistemas tienen energías potenciales de esta forma, la condición no es una restricción muy seria.

La separación de variables conduce a la conclusión de que la función $\psi(x)$, que especifica la dependencia espacial de la función de onda $\Psi(x,t) = \psi(x)\varphi(t)$, es una solución a la ecuación diferencial

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

denominada la *ecuación de Schrödinger independiente del tiempo*. Obsérvese que esta ecuación es más simple que la ecuación de Schrödinger para la misma energía potencial debido a que sólo contiene una variable independiente x y por lo tanto es una ecuación diferencial ordinaria en

vez de una ecuación diferencial parcial. La técnica proporciona aun más información acerca de la función $\varphi(t)$ especificando la dependencia temporal de la función de onda. De hecho, se demostrará que $\varphi(t)$ satisface una ecuación diferencial ordinaria simple que se puede resolver de inmediato conduciendo a la expresión simple

$$\varphi(t) = e^{-iEt/\hbar}$$

donde E es la energía total de la partícula en el sistema. La separación de variables es una técnica tan útil que se empleará en varias ocasiones en lo que resta del libro. Ahora se desarrollarán los detalles de su aplicación a la ecuación de Schrödinger.

Substituyendo la forma supuesta para la solución $\Psi(x,t) = \psi(x)\varphi(t)$, en la ecuación de Schrödinger y restringiéndonos a las energías potenciales independientes del tiempo que se pueden escribir como $V(x)$, se obtiene

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)\varphi(t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x)\varphi(t) = i\hbar \frac{\partial \psi(x)\varphi(t)}{\partial t}$$

Ahora

$$\frac{\partial^2 \psi(x)\varphi(t)}{\partial x^2} = \varphi(t) \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = \varphi(t) \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2}$$

La notación $\partial^2 \psi(x)/\partial x^2$ resulta redundante con $d^2 \psi(x)/dx^2$ ya que $\psi(x)$ es una función sólo de x . Similarmente,

$$\frac{\partial \psi(x)\varphi(t)}{\partial t} = \psi(x) \frac{\partial \varphi(t)}{\partial t} = \psi(x) \frac{d\varphi(t)}{dt}$$

Por lo tanto, se tiene

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \varphi(t) \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x)\varphi(t) = i\hbar \psi(x) \frac{d\varphi(t)}{dt}$$

Dividiendo ambos miembros de esta ecuación entre $\psi(x)\varphi(t)$, se tiene

$$\frac{1}{\psi(x)} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) \right] = i\hbar \frac{1}{\varphi(t)} \frac{d\varphi(t)}{dt} \quad (5-36)$$

Obsérvese que el segundo miembro de (5-36) no depende de x mientras que el primer miembro no depende de t ; consecuentemente su valor común no puede depender ni de x ni de t . En otras palabras, el valor común deberá ser constante y se le denotará por G . El resultado de esta consideración es que (5-36) conduce a dos ecuaciones separadas. Una ecuación se obtiene haciendo el primer miembro igual al valor común

$$\frac{1}{\psi(x)} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) \right] = G \quad (5-37)$$

La otra ecuación se obtiene haciendo el segundo miembro igual al valor común

$$i\hbar \frac{1}{\varphi(t)} \frac{d\varphi(t)}{dt} = G \quad (5-38)$$

A la constante G se le llama *constante de separación*, por la misma razón por la que a esta técnica para resolver ecuaciones diferenciales parciales se le llama separación de variables.

Retrospectivamente se ve que el efecto de emplear la técnica ha sido convertir la ecuación diferencial parcial simple que contiene dos variables independientes x y t en un par de ecuaciones diferenciales ordinarias, una que contiene solamente a x y la otra solamente a t . Estas ecuaciones están acopladas, en el sentido de que ambas contienen la misma constante de separación G , pero este tipo de acoplamiento no presenta ninguna dificultad para obtener las soluciones a las ecuaciones. Se encontrará que la ecuación temporal (5-38) tiene una solución muy simple. Además, cuando se exija que esta solución concuerde con el postulado de de Broglie-Einstein, se verá que el valor de la constante de separación G resulta determinada. Substituyendo este valor de G en la ecuación espacial (5-37) se obtiene una ecuación diferencial ordinaria cuyas soluciones se pueden obtener utilizando una de las muchas técnicas comunes que se han desarrollado para resolver esas ecuaciones. Lo que se ha hecho es reducir el problema de resolver la ecuación de Schrödinger diferencial parcial dependiente del espacio y del tiempo (5-22), al de resolver la ecuación diferencial ordinaria dependiente del espacio. El producto de la solución de esta ecuación y de la solución de la ecuación temporal es la solución deseada de la ecuación de Schrödinger.

Se puede ver que la forma del producto $\Psi(x, t) = \psi(x)\varphi(t)$, que se ha supuesto para la función de onda está justificada, ya que se podrá llevar a cabo el procedimiento descrito. También se verá que si la función energía potencial depende de x y de t no es posible efectuar la separación de (5-36) en el par de ecuaciones que se obtuvieron de ella. La razón es que no es posible separar términos de manera que un miembro de la ecuación no dependa de x a la vez que el otro sea independiente de t .

La ecuación temporal (5-38) es una ecuación diferencial ordinaria de primer orden en φ como función de t . Existen varias técnicas disponibles para encontrar la solución a esas ecuaciones. Todas estas técnicas tienen un rasgo común: implican la suposición de una forma general para las soluciones, que al sustituirla en la ecuación diferencial permite determinar, de la ecuación resultante, la forma específica requerida para la solución. Después de estudiar estas técnicas casi es posible desarrollar una intuición suficiente como para ser capaz de adivinar la forma específica de la solución en el primer intento, al menos para ecuaciones diferenciales simples. Este es un ahorro de tiempo y un procedimiento perfectamente legítimo, toda vez que la adivinanza se verifica substituyéndola en la ecuación diferencial y mostrando que la ecuación se satisface. Este es el procedimiento que usualmente se utilizará en este libro. Considérese (5-38) que una vez arreglada se puede escribir

$$\frac{d\varphi(t)}{dt} = -\frac{iG}{\hbar} \varphi(t) \quad (5-39)$$

Esta ecuación diferencial establece que la función $\varphi(t)$, que es su solución, tiene la propiedad de que su primera derivada es proporcional a la función misma. Alguien con mucha experiencia en diferenciar no tendría dificultad en adivinar que $\varphi(t)$ deberá ser una función exponencial. Por lo tanto, suponga que la solución a la ecuación diferencial es de la forma

$$\varphi(t) = e^{\alpha t}$$

donde α es una constante que se determinará en breve. Verificando mediante diferenciación esta supuesta solución, se obtiene

$$\frac{d\varphi(t)}{dt} = \alpha e^{\alpha t} = \alpha \varphi(t)$$

y a continuación se substituye en (5-39). Esto produce

$$\alpha \varphi(t) = -\frac{iG}{\hbar} \varphi(t)$$

Si se hace

$$\alpha = -\frac{iG}{\hbar}$$

la solución supuesta obviamente satisface la ecuación. Por lo tanto

$$\varphi(t) = e^{-iGt/\hbar} \quad (5-40)$$

es una solución a (5-38) o (5-39).

La solución $\varphi(t)$ se ha escrito en (5-40) con una exponencial compleja, pero se puede escribir como

$$\varphi(t) = e^{-iGt/\hbar} = \cos \frac{Gt}{\hbar} - i \sin \frac{Gt}{\hbar} \quad (5-41a)$$

o

$$\varphi(t) = \cos 2\pi \frac{G}{h} t - i \sin 2\pi \frac{G}{h} t \quad (5-41b)$$

Se ve que $\varphi(t)$ es una función oscilatoria en el tiempo, de frecuencia $\nu = G/h$. Pero según los postulados de de Broglie-Einstein (5-8), la frecuencia también deberá estar dada por $\nu = E/h$, donde E es la energía total de la partícula asociada con la función de onda correspondiente a $\varphi(t)$. Por supuesto que la razón es que $\varphi(t)$ es la función que especifica la dependencia temporal de la función de onda. Comparando estas expresiones se ve que la constante de separación deberá ser igual a la energía total de la partícula. Esto es

$$G = E \quad (5-42)$$

Utilizando este valor de G en la ecuación espacial (5-37) que se obtuvo de la separación de variables, se tiene

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (5-43)$$

Usando este valor de G en la solución (5-40) de la ecuación temporal, de modo que se complete la especificación de $\varphi(t)$, la forma de producto de la función de onda resulta

$$\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar} \quad (5-44)$$

donde E es la energía total de la partícula.

A la ecuación (5-43) se le llama la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, ya que la variable t no interviene en la ecuación. Sus soluciones $\psi(x)$ independientes del tiempo determinan, a través de (5-44) la dependencia espacial de las soluciones $\Psi(x, t)$ de la ecuación de Schrödinger. Para los casos unidimensionales que se han tratado en este capítulo la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo solamente puede contener una variable independiente x y por lo tanto será una ecuación diferencial ordinaria. Sin embargo, si hay más dimensiones espaciales, la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo contendrá más variables independientes y por tanto será una ecuación diferencial parcial. (Usualmente se pueden reducir a un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias mediante la aplicación de la técnica de separación de variables).

En todos los casos, la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo no contiene al número imaginario i y por lo tanto sus soluciones $\psi(x)$ no necesariamente serán funciones complejas. (Es decir, $\psi(x)$ no necesariamente es compleja, pero puede serlo si así conviene). Esta

ecuación y sus soluciones son esencialmente idénticas a las ecuaciones diferenciales independientes del tiempo para el movimiento ondulatorio clásico y sus soluciones.

Las funciones $\psi(x)$ se llaman *eigenfunciones*. La primera parte *eigen* es la palabra alemana para característica. Posteriormente se tendrá una idea más clara de por qué característico es un vocablo apropiado. Aquí será suficiente decir que su uso es convencional. También es convencional el no traducirlo al inglés o al español, probablemente en honor al papel tan preponderante que tuvieron en el desarrollo de la mecánica cuántica los físicos de habla alemana.

El estudiante deberá ser muy cuidadoso en mantener claramente la diferencia entre las eigenfunciones $\psi(x)$ y las funciones de onda $\Psi(x,t)$, así como la diferencia entre la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo y la ecuación de Schrödinger misma. Las funciones de onda siempre se representarán por una letra Ψ mayúscula, y las eigenfunciones por la letra ψ minúscula.

Ejemplo 5-11. Desarrollar un argumento de plausibilidad similar al dado en la sección 5-2, que conduzca directamente a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.

Suponga que la ecuación debe concordar con la ecuación clásica de la energía

$$\frac{p^2}{2m} + V = E$$

y también con el postulado de de Broglie

$$p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k$$

Esas dos relaciones combinadas producen

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V = E$$

o

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V)$$

A continuación se supone que la dependencia espacial de la función de onda para una partícula libre está dada por la expresión

$$\psi(x) = \sin \frac{2\pi x}{\lambda} = \sin kx$$

El número de onda k es constante ya que la energía potencial V es constante para el caso de una partícula libre y ya que la energía total también es constante. Diferenciando dos veces $\psi(x)$ con respecto a su única variable independiente, se obtiene

$$\frac{d\psi(x)}{dx} = -k \cos kx$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k^2 \sin kx = -k^2 \psi(x)$$

ya que k es una constante. Ahora se substituye k^2 por el valor encontrado arriba y se obtiene

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \psi(x)$$

o

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V\psi(x) = E\psi(x)$$

Esta es la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, pero se ha obtenido de un argumento específico para el caso de una partícula libre en el que V es una constante. Si se postula, como en la sección 5-2, que la ecuación es válida aún en el caso general en el que $V = V(x)$ se obtiene la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para una partícula actuada por una fuerza.

En el texto se ha seguido un camino muy largo para obtener la misma ecuación, pero por supuesto que se ha aprendido mucho a lo largo del camino y que no está contenido en la ecuación de Schrödinger independientemente del tiempo. Por ejemplo, se sabe de la dependencia temporal de la función de onda $\Psi(x,t) = \psi(x)e^{iEt/\hbar}$, que es responsable del carácter necesariamente complejo y de muchas consecuencias que de esto resulta. ◀

5.6 Propiedades requeridas para las eigenfunciones

En la siguiente sección se considerará de manera muy general el problema de encontrar soluciones a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Estas consideraciones mostrarán que la cuantización de la energía aparece de manera muy general en la teoría de Schrödinger. Se verá que esta propiedad extremadamente importante resulta del hecho de que solamente es posible encontrar *soluciones aceptables* a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para ciertos valores de la energía total E .

Para que una solución sea aceptable, se requiere que una eigenfunción $\psi(x)$ y su derivada $d\psi(x)/dx$ tengan las siguientes propiedades:

$\psi(x)$ debe ser *finita*
 $\psi(x)$ debe ser *monovaluada*
 $\psi(x)$ debe ser *continua*

$d\psi(x)/dx$ debe ser *finita*
 $d\psi(x)/dx$ debe ser *monovaluada*
 $d\psi(x)/dx$ debe ser *continua*

Estos requisitos se imponen para asegurar que la eigenfunción sea una función matemáticamente "bien comportada" con objeto de que las cantidades mensurables que se pueden evaluar a partir de la eigenfunción sean también bien comportadas. La figura 5-8 ilustra el significado de estas propiedades representando funciones que no son finitas, no monovaluadas o no continuas, en el punto x_0 .

Si $\psi(x)$ o $d\psi(x)/dx$ no fuera finita o no fuera monovaluada, entonces lo mismo sería cierto para $\Psi(x,t) = e^{-iEt/\hbar}\psi(x)$ o $\partial\Psi(x,t)/\partial x = e^{-iEt/\hbar} d\psi(x)/dx$. Ya que la fórmula general (5-34) para calcular los valores de expectación de la posición o el impulso contiene $\Psi(x,t)$ y $\partial\Psi(x,t)/\partial x$, se ve que en cualesquiera de los casos *no se obtendrían valores finitos y definidos cuando se evaluaran cantidades mensurables*. Esto sería completamente inaceptable debido a que las cantidades mensurables, como el valor de expectación de la posición \bar{x} o del impulso p no se comportan de manera irrazonable. (En circunstancias muy raras, con las que no nos encontraremos, $\psi(x)$ puede irse a infinito en un punto, siempre que lo haga lo suficientemente lento como para mantener finita la integral de $\psi^*(x)\psi(x)$ sobre una región que contenga al punto en cuestión).

Para que $d\psi(x)/dx$ sea finita, es necesario que $\psi(x)$ sea continua. La razón es que cualquier función tiene siempre una primera derivada infinita si tiene una discontinuidad. La necesidad de que $d\psi(x)/dx$ sea continua se puede demostrar considerando la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo que se escribió como

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E]\psi(x)$$

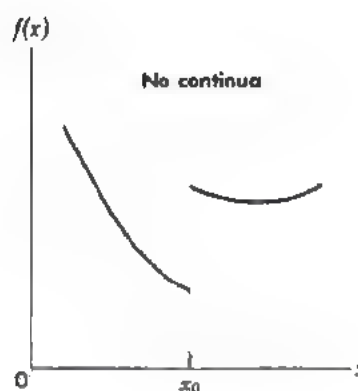
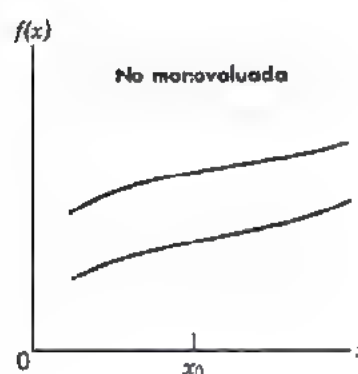
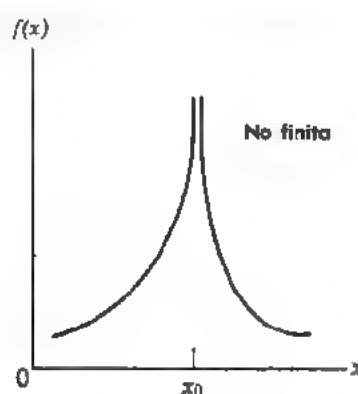
**FIGURA 5-8**

Ilustración de funciones que no son finitas, o monovaluadas, o continuas, en un punto x_0 .

Para $V(x)$, E y $\psi(x)$, finitas se ve que $d^2\psi(x)/dx^2$ debe ser finita. Esto exige que $d\psi(x)/dx$ sea continua ya que cualquier función que tiene una discontinuidad en la primera derivada tendrá una segunda derivada infinita en ese punto. (Observe que existen discontinuidades en la primera derivada de la eigenfunción para la partícula en una caja que se consideró en el ejemplo 5-9. Estas ocurren en las paredes de la caja y provienen del hecho de que el sistema es una idealización en la cual se supone que las paredes son completamente impenetrables sin importar qué tan alta sea la energía de la partícula. Esto es, se supone que la energía potencial se hace infinita en las paredes. Esto se discute bastante en el capítulo siguiente).

La importancia de estos requisitos sobre las propiedades de soluciones aceptables a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo no se pueden exagerar. Las ecuaciones diferenciales tienen una amplia variedad de soluciones posibles y sólo cuando se selecciona de todas las posibles soluciones aquellas que satisfacen estos requerimientos es que se obtiene la cuantización de la energía u otras propiedades igualmente importantes de la teoría de Schrödinger y que se tratarán en el capítulo siguiente. Los requisitos de finitud y continuidad se utilizarán de inmediato; el que sea monovaluada se utilizará después pero es igualmente importante.

5.7 Cuantización de la energía en la teoría de Schrödinger

Es educativo estudiar el problema de obtener soluciones aceptables a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo con argumentos cualitativos que manejen las curvaturas y pendientes de las curvas que se obtienen al graficar la solución. Como se verá, estos argumentos son muy generales y muy simples. Estos nos pueden enseñar muchas propiedades importantes de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, evitando así argumentos que implican matemáticas. De hecho, el punto de vista que se utilizará aquí es muy útil para hacer una investigación preliminar de las propiedades de casi cualquier ecuación diferencial y también proporciona una comprensión intuitiva del comportamiento de estas ecuaciones.

De estos argumentos solamente se obtendrán conclusiones cualitativas pero que serán muy valiosas; en los siguientes capítulos se encontrará un número de soluciones cuantitativas para la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para varios potenciales. Estas soluciones se obtendrán a partir de técnicas analíticas comunes para resolver ecuaciones diferenciales. También en el apéndice F se encontrará una solución cuantitativa a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Esta solución se obtiene utilizando una técnica numérica que está basada en las mismas ideas utilizadas en los argumentos cualitativos de esta sección y así el estudiante deseará leer el apéndice después de leer esta misma.

Se comenzará con los argumentos, escribiendo la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo como

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E]\psi \quad (5-45)$$

Las propiedades de esta ecuación diferencial dependen, entre otras cosas, de la forma de la función energía potencial $V(x)$, o cual es así ya que $V(x)$ determina la fuerza que actúa sobre la partícula cuyo comportamiento se supone describe las soluciones a la ecuación diferencial. En consecuencia, no se puede decir mucho acerca de las propiedades de la ecuación diferencial, hasta que no se diga algo acerca de $V(x)$, por lo tanto primero se hará esto.

En la figura 5-9 se especifica la forma de $V(x)$ que se utilizará en estos argumentos, graficándola contra su variable independiente x . La forma se ha escogido de manera que

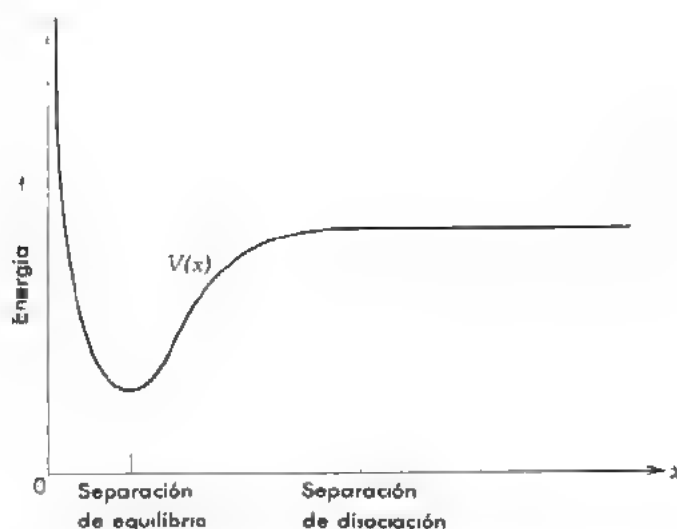
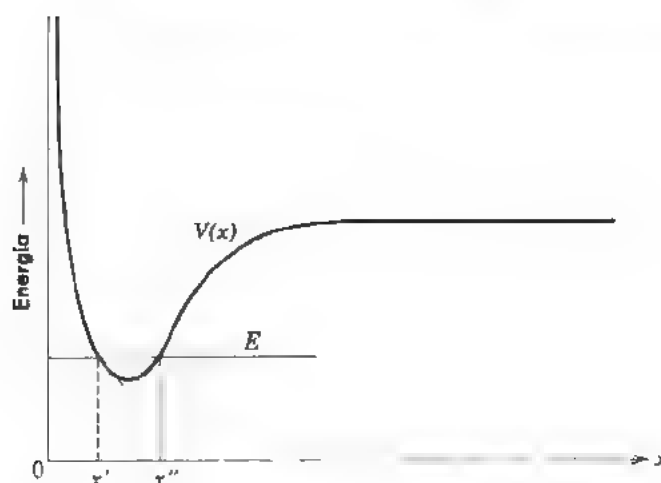


FIGURA 5-9

Energía potencial $V(x)$ para un átomo que puede estar ligado a un átomo similar para formar una molécula diatómica, graficada como una función de la separación entre los centros de los dos átomos

**FIGURA 5-10**

Energía potencial $V(x)$ utilizada en los argumentos cuánticos concernientes a las soluciones de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo y la energía total escogida para estos argumentos.

contenga rasgos que permitan ilustrar varios puntos interesantes; pero la forma también tiene significado físico. Representa la energía potencial para un átomo que puede estar ligado a un átomo similar y formar una molécula diatómica. En este caso la coordenada x representa la separación entre los centros de los dos átomos. El mínimo en $V(x)$ ocurre para la separación de equilibrio y en él la fuerza que actúa sobre el átomo es $F = -dV(x)/dx = 0$. Conforme la separación del valor de equilibrio decrezca, aparecerá una fuerza repulsiva en la dirección en la que se incrementa la separación y se hace mayor entre más cerca están los átomos. Cuando la separación aumente aparecerá una fuerza atractiva en la dirección en la que la separación decrezca. Pero si la separación excede la separación de disociación indicada en la figura 5-9, la fuerza cae a cero ya que la molécula se rompe y los átomos ya no interaccionan.

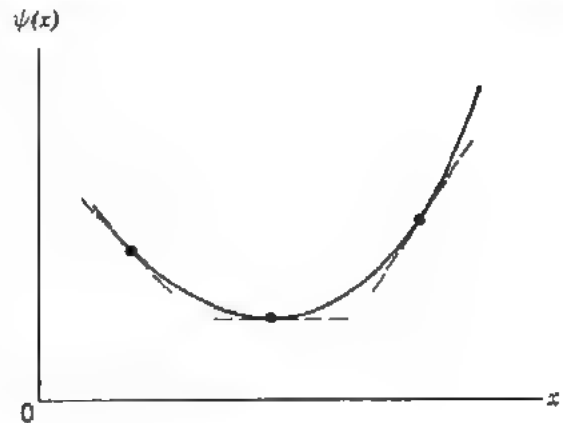
Con la elección de $V(x)$ la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (5-45) empieza a tomar una forma específica. Ya que esta ecuación diferencial contiene la energía total E en una situación crucial, se deberá escoger su valor de modo que la ecuación tenga propiedades que sean lo suficientemente específicas como para hacerla fácil de analizar. El valor seleccionado está indicado en la figura 5-10 por la línea horizontal, energía = E = constante. Esta figura también muestra la curva: energía = $V(x)$. Se escoge la energía total E de tal manera que la molécula esté ligada (clásicamente la distancia de separación x entre los átomos deberá estar entre los valores x' y x'' mostrados en la figura), pero el valor exacto de E que se escoge en esta etapa es arbitrario. No se tiene que decir nada acerca de la combinación de parámetros $2m, \hbar^2$ que aparece en la ecuación diferencial, excepto que tiene un valor positivo.

El argumento considerará la ecuación (5-45) como una fórmula que determina el valor de la segunda derivada $d^2\psi/dx^2$ de la solución, en una x determinada, en términos de los valores de $(2m/\hbar^2) [V(x) - E]$ y de la solución ψ misma en esa x . Eso permitirá estudiar propiedades importantes de la ecuación en términos de la forma general de la curva trazada por una gráfica de ψ contra x . Entonces se obtendrá una interpretación geométrica de la ecuación diferencial.

Particularmente se atenderá al signo de $d^2\psi/dx^2$ ya que es una propiedad de las segundas derivadas que una curva, de la variable dependiente graficada contra la variable independiente, es cóncava hacia arriba siempre que la segunda derivada sea positiva y cóncava hacia abajo siempre que la segunda derivada sea negativa. Los estudiantes que aún no estén familiarizados con esta propiedad deberán analizar la figura 5-11 que muestra un caso en el cual la pendiente de

FIGURA 5-11

Curva que es *cóncava hacia arriba*. El valor de la primera derivada de la función representada por la curva, aumenta al aumentar x , así la segunda derivada es positiva.



la curva de ψ contra x es negativa para x pequeñas, se hace menos negativa cuando x aumenta, pasa por cero y entonces se hace positiva conforme x continúa aumentando. La pendiente que es igual a $d\psi/dx$ siempre aumenta en valor numérico conforme x aumenta. Por lo tanto, la razón de cambio de la pendiente que es igual a $d^2\psi/dx^2$ siempre es positiva. Se dice que la curva en esta figura es *cóncava hacia arriba*. La figura 5-12 muestra un caso en el cual se dice que la curva es *cóncava hacia abajo*. Consideraciones similares prueban que en este caso $d^2\psi/dx^2$ siempre es negativa.

Ahora obsérvese que en la figura 5-10 hay dos intersecciones de la línea energía $= E$ y la curva energía $= V(x)$. Estas intersecciones ocurren en $x = x'$ y $x = x''$, las cuales dividen al eje x en tres regiones: $x < x'$, $x' < x < x''$, y $x > x''$. En la primera y tercera regiones la cantidad $[V(x) - E]$ es positiva ya que el valor de $V(x)$ siempre es mayor que el valor de E en estas regiones. En la segunda región $[V(x) - E]$ es negativa. El análisis de (5-45) muestra entonces que el signo de $d^2\psi/dx^2$ es el mismo que el signo de ψ en la primera y tercera regiones y es opuesto al signo de ψ en la segunda región, ya que el signo de $2m/\hbar^2$ es positivo. Esto significa que en la primera y tercera regiones la curva de ψ contra x será cóncava hacia arriba si el valor de ψ misma es positiva y será cóncava hacia abajo si el valor de ψ es negativo. En la segunda región la curva será cóncava hacia abajo si ψ es positiva y será cóncava hacia arriba si ψ es negativa. Las distintas posibilidades se muestran en la figura 5-13. Se han sentado las bases para la interpretación geométrica de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.

Para una forma de la energía potencial $V(x)$ dada, la ecuación diferencial establece una relación entre $d^2\psi/dx^2$ y ψ que determina el comportamiento *general* de ψ . Si además se especifica el valor de ψ y de su primera derivada $d\psi/dx$ para algún valor de la variable independiente x , entonces el comportamiento *particular* de la variable dependiente ψ está determinado para todos los valores de x . La situación es completamente análoga a las situaciones que se

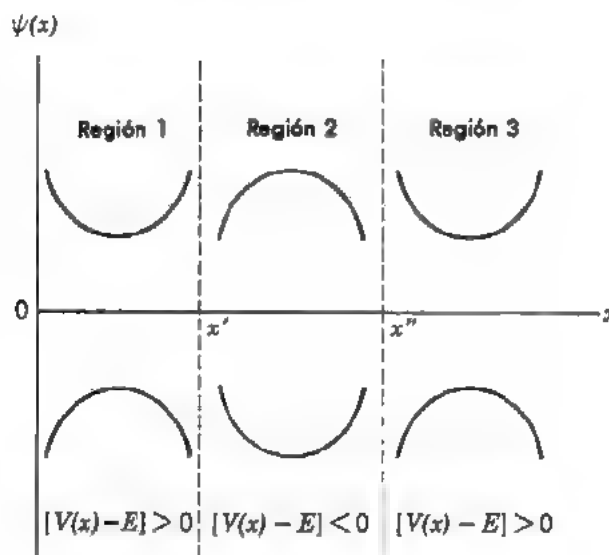
FIGURA 5-12

Curva *cóncava hacia abajo*. El valor de la primera derivada de la función decrece cuando x crece, así la segunda derivada es negativa.



FIGURA 5-13

Ilustración de la relación entre el signo de ψ y el signo de $d^2\psi/dx^2$ en las regiones definidas por el signo de $[V(x) - E]$. La relación se puede resumir estableciendo que ψ es cóncava desde el eje x siempre que $[V(x) - E] > 0$, y cóncava hacia el eje x siempre que $[V(x) - E] < 0$.



encontraron en la mecánica clásica. Considérese la ecuación diferencial para un oscilador armónico simple clásico

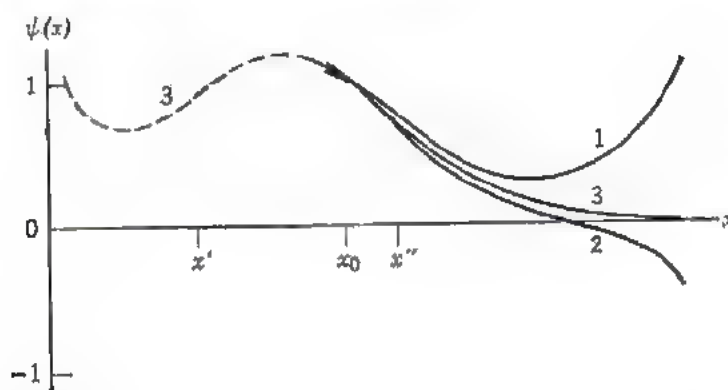
$$\frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{Cx}{m}$$

Esta es justamente la ley de Newton del movimiento, $a = F/m$, con una constante de restitución C . En este caso x es la variable dependiente y t la variable independiente, pero por lo demás la analogía es completa. La ecuación diferencial establece una relación entre x y su segunda derivada que determina el comportamiento general de x como una función de t . Otra vez, si se especifica el valor de x y de su primera derivada dx/dt para algún valor de t (las condiciones iniciales del movimiento), entonces el comportamiento particular de x está determinado para todos los valores de t .

Por lo tanto, sería posible utilizar la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, para la $V(x)$ y la E escogidas, para determinar el comportamiento de ψ para toda x en términos de los valores de ψ y de $d\psi/dx$ supuestos para alguna x particular. En los siguientes capítulos y en el apéndice F se muestran los cálculos cuantitativos a este respecto; aquí se obtendrán resultados cualitativos a partir de argumentos basados en las características de la ecuación diferencial desarrollada. Los argumentos se presentarán como "cálculos pensados", con el mismo espíritu que los argumentos pensados de Einstein o Bohr.

En la curva 1 de la figura 5-14 se indican cualitativamente los resultados de un cálculo pensado que comienza con los valores de ψ y de $d\psi/dx$ supuestos para un punto conveniente x_0 en la segunda región y continúa trazando el comportamiento de ψ en la dirección en la que x crece. Puesto que el valor inicial de ψ se escogió como positivo en la región $x' < x < x''$, se encuentra que la curva descrita por ψ es inicialmente cóncava hacia abajo y continúa así hasta que pasa a la tercera región $x > x''$, donde $[V(x) - E]$ cambia de signo. No obstante que la pendiente de la curva era negativa en $x = x''$, rápidamente se hace cero y después positiva. Entonces ψ empieza a crecer en valor y rápidamente pasa de mal a peor. La razón es que la ecuación diferencial muestra que el ritmo de cambio dependiente, es decir, $d^2\psi/dx^2$ es proporcional a la distancia de la curva al eje, es decir, ψ . Este primer cálculo produce una ψ que se va al infinito conforme crece x . Se encontró una solución parcial a la ecuación diferencial, pero no fue una solución aceptable, porque una eigenfunción aceptable permanece finita.

La curva 2 de la figura 5-14 indica el resultado de otro intento por encontrar una solución aceptable. No hubo cambio en el valor inicial supuesto para ψ que hubiera sido solamente expandir o contraer la escala vertical de la curva debido a la linealidad de la ecuación

**FIGURA 5-14**

Tres intentos para encontrar una solución aceptable para la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para un valor supuesto de la energía total E . Las dos primeras (1,2) fallan porque la solución se hace infinita para x grandes. La tercera dio una solución con comportamiento aceptable para x grande, pero falla porque la solución se hace infinita para x pequeña (curva punteada).

diferencial. Lo que se hizo fue cambiar el valor inicial puesto para $d\psi/dx$. El intento no tuvo éxito ya que ψ resulta negativa en la región donde $[V(x) - E]$ es positiva. La curva resulta cóncava hacia abajo y se va a menos infinito.

Ahora resultará evidente la dificultad para obtener una eigenfunción aceptable. También resultará evidente que escogiendo *exactamente* el valor inicial de $d\psi/dx$, es posible encontrar una ψ cuyo comportamiento aceptable al crecer x es el que se indica por la curva 3 de la figura 5-14. Para esta ψ la curva es cóncava hacia arriba en la tercera región, ya que permanece por encima del eje x . Sin embargo, la curva no dobla hacia arriba ya que conforme crece x , ésta se encuentra cada vez más cerca del eje y mientras más cerca está la curva se hace menos cóncava hacia arriba. Esto es $d^2\psi/dx^2$ se aproxima a cero conforme ψ se aproxima a cero ya que la ecuación diferencial dice que estas dos cantidades son proporcionales.

En la figura 5-14 también se indican mediante una curva punteada los resultados de extender la ψ de la curva 3 en la dirección en la que x decrece. Del análisis anterior se debe esperar que, en general, ψ se irá ya sea hacia más o hacia menos infinito cuando se le extiende hacia las x decrecientes. Esto no se puede evitar ajustando la elección inicial de $d\psi/dx$, ya que esto perturbaría el comportamiento aceptable para x grandes, tampoco se puede evitar el valor infinito de ψ para x pequeñas uniendo dos funciones ψ diferentes con pendientes diferentes en $x = x_0$, lo cual está reglamentado por el requisito de que para una eigenfunción aceptable, $d\psi/dx$ es continua en todas partes. Por una razón similar no es posible tratar una discontinuidad en ψ misma. Estamos forzados a concluir que para el valor particular de la energía total E que se escogió inicialmente, no existe solución aceptable a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. La relación entre ψ y su segunda derivada $d^2\psi/dx^2$, que impone la ecuación diferencial para una $V(x)$ dada y la E correspondiente, es tal que se aproximará a $\pm\infty$ ya sea para x grandes o x pequeñas (o ambas). La solución a la ecuación diferencial es inestable en el sentido de que tiene una tendencia pronunciada a irse a infinito en las regiones donde $E < V$.

Sin embargo, repitiendo este procedimiento para muchas elecciones diferentes de la energía E , eventualmente será posible encontrar un valor E_1 para el cual la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo tiene una solución aceptable ψ_1 . De hecho, en general existirán un número de valores permitidos de la energía total E_1, E_2, E_3, \dots para los cuales la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo tiene soluciones aceptables $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots$. En la figura 5-15 se indica la forma de las primeras tres soluciones aceptables. El comportamiento de ψ_1 tanto para x pequeñas como grandes, es el mismo que el comportamiento para x grandes de la función

mostrada en la curva 3 de la figura 5-14. Para $x' < x_0$, el comportamiento de ψ_2 inicialmente es similar al comportamiento de ψ_1 , pero ya que su segunda derivada es relativamente grande en magnitud, ψ_2 cruza el eje en algún valor de x menor que x_0 pero mayor que x' . Cuando esto sucede, el signo de la segunda derivada se invierte y la función resulta cóncava hacia arriba. En $x = x'$ nuevamente se invierte la segunda derivada y para $x < x'$, la función gradualmente se aproxima al eje x .

De la figura 5-15 se puede ver que la energía permitida E_2 es mayor que la energía permitida E_1 . Considérese el punto x_0 en el que ψ_1 y ψ_2 tienen el mismo valor. De la figura es evidente que en ese punto la razón de cambio de la pendiente para ψ_2 excede por la misma cantidad al de ψ_1 es decir,

$$\left| \frac{d^2\psi_2}{dx^2} \right| > \left| \frac{d^2\psi_1}{dx^2} \right|$$

Utilizando esto en la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (5-45), se encuentra que

$$|V(x) - E_2| > |V(x) - E_1|$$

De la figura 5-15 es evidente que si esto es cierto en x_0 entonces

$$E_2 > E_1$$

ya que $E > V(x)$ para x_0 . De argumentos similares es posible demostrar que $E_3 > E_2$. También resulta evidente que las diferencias de energía $E_2 - E_1$, $E_3 - E_2$, no son infinitesimales puesto que, por ejemplo, la diferencia en la primera desigualdad mostrada arriba no es infinitesimal. Por tanto, los valores permitidos de la energía están *bien separados* y forman un *conjunto discreto* de energías. Para una partícula que se mueve bajo la influencia de un potencial $V(x)$ independiente del tiempo, solamente existen soluciones aceptables a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo si la energía de la partícula está *cuantizada*, esto es, restringida a un conjunto discreto de energías E_1, E_2, E_3, \dots

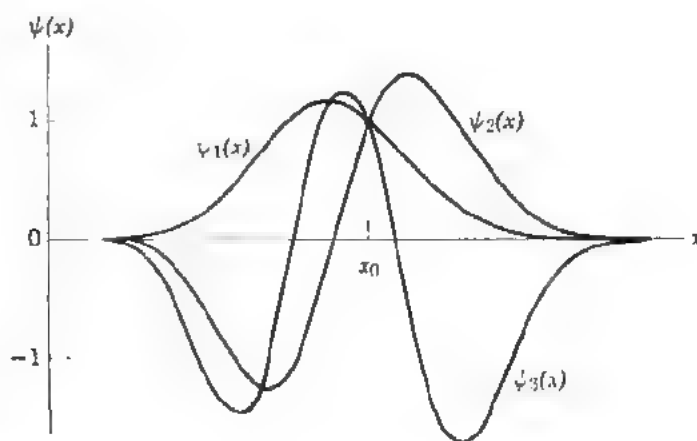


FIGURA 5-15

Forma de las eigenfunciones aceptables correspondientes a los tres estados de energía mínima permitida para un potencial con un mínimo. Para $x = x_0$ las tres funciones tienen el mismo valor, pero ψ_3 tiene la mayor curvatura porque corresponde a la energía mayor entre estas tres. Las soluciones son para el potencial de la figura 5-10 y no son simétricas entre izquierda y derecha porque el potencial no es simétrico alrededor de su mínimo.

Esta aseveración es válida siempre que la relación entre la energía potencial $V(x)$ y la energía total E sea similar a la que se muestra en la figura 5-10, en el sentido de que existen dos valores para la coordenada, x' y x'' , con $[V(x) - E]$ positiva para toda $x < x'$ y también positiva para toda $x > x''$. Pero para un potencial del tipo ilustrado en la figura 5-9, esto es, un potencial que tiene un valor límite finito V_l cuando x se hace muy grande, generalmente sólo existe lugar para un número finito de valores de energía permitidos discretos, los cuales satisfacen la relación $E < V_l$; esto se ilustra en la figura 5-16. Para $E > V_l$, la situación cambia, ahora la molécula no está ligada (clásicamente la distancia de separación x entre los átomos puede tener cualquier valor mayor que x). Por lo que concierne a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, solamente hay dos regiones del eje x : $x < x'$ y $x > x''$. En la segunda región $V(x) - E$ será negativa para todos los valores de x sin importar cuán grande sea ésta; pero cuando $[V(x) - E]$ es negativa ψ es cóncava hacia abajo si su valor es positivo y cóncava hacia arriba si su valor es negativo. Esta siempre tiende a regresar al eje x y por lo tanto es una función oscilatoria; consecuentemente, no existe problema de que $\psi(x)$ se vaya a infinito para valores grandes de x . Ya que siempre es posible que $\psi(x)$ se aproxima gradualmente al eje para valores pequeños de x mediante una selección inicial apropiada de $d\psi/dx$, y entonces será posible encontrar una eigenfunción aceptable para cualquier valor de $E > V_l$. Entonces los valores de energía permitidos para E_l están distribuidos de manera continua y se dice que forman un continuo. Es evidente que si el potencial $V(x)$ está restringido en valor para valores de x pequeños, o para valores de x grandes y pequeños, entonces las energías permitidas formarán un continuo para todas las energías mayores que la V_l más baja.

La conclusión de nuestros argumentos se puede establecer concisamente como sigue:

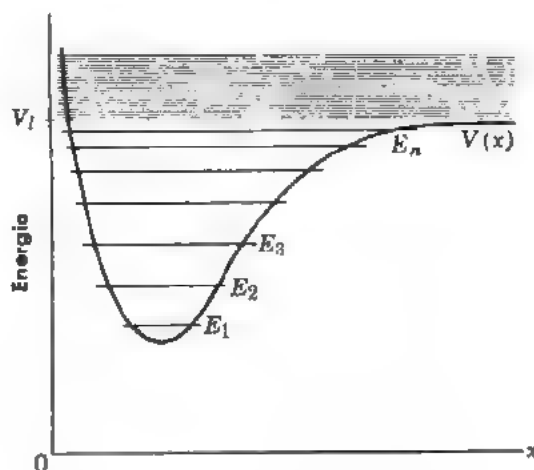
Cuando la relación entre la energía total de una partícula y su energía potencial es tal que clásicamente la partícula debería estar ligada a una región limitada del espacio debido a que la energía potencial debería exceder a la energía total fuera de la región, entonces la teoría de Schrodinger predice que la energía total está cuantizada. Cuando esta relación es tal que la partícula no está ligada a una región limitada, entonces la teoría predice que la energía total puede tener cualquier valor.

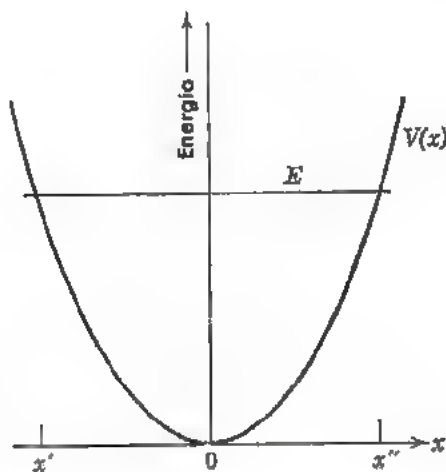
Puesto que en la mecánica clásica una partícula ligada a una región limitada debería moverse periódicamente entre los límites de la región, las reglas de Wilson Sommerfeld de la teoría cuántica antigua también deberían predecir una cuantización de la energía de la partícula en estas circunstancias. Pero estas reglas de cuantización eran un postulado de la teoría cuántica antigua que tenían una justificación en la relación de de Broglie sólo para ciertos casos especiales. En su primera publicación sobre mecánica cuántica, Schrödinger escribió:

"El punto esencial es el hecho de que los misteriosos "requisitos de integridad" no permanecen en las reglas de cuantización pero han trazado, por así decirlo, un paso que ha mostrado el resultado de la finitud y el valor único de ciertas funciones espaciales (una eigenfunción)".

FIGURA 5-16

Ilustración de energías permitidas separadas discretamente E_n que se encuentran por debajo del valor límite V_l de un potencial $V(x)$, y el continuo de E_n que se encuentra por arriba. Puesto que $E_{n+1} - E_n$ decrece conforme $V(x)$ se aproxima a V_l , si el acercamiento es lo suficientemente gradual puede haber un número infinito de $E_n < V_l$. Pero generalmente sólo hay un número finito.



**FIGURA 5-17**

La energía potencial $V(x)$ y uno de los valores más altos permitidos para la energía total E para un oscilador armónico simple.

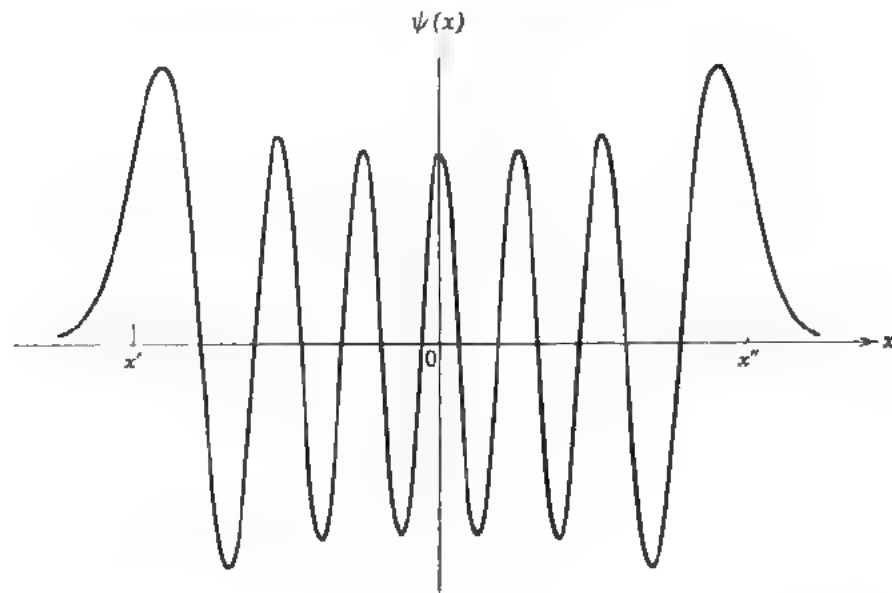
Ejemplo 5-12. Usar los argumentos desarrollados en esta sección para dar conclusiones *cualitativas* concernientes con la forma de las eigenfunciones para uno de los estados de energía más alta de un oscilador armónico simple. Comparar a continuación la función densidad de probabilidad correspondiente, con la que debería predecirse para un oscilador armónico simple clásico de la misma energía.

El potencial $V(x)$ para un oscilador armónico simple (ver ejemplo 5-3) está representado por la curva de la figura 5-17. En la misma figura uno de los mayores valores permitidos de la energía total E está representado por una línea horizontal. De acuerdo con la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (5-45)

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E]\psi$$

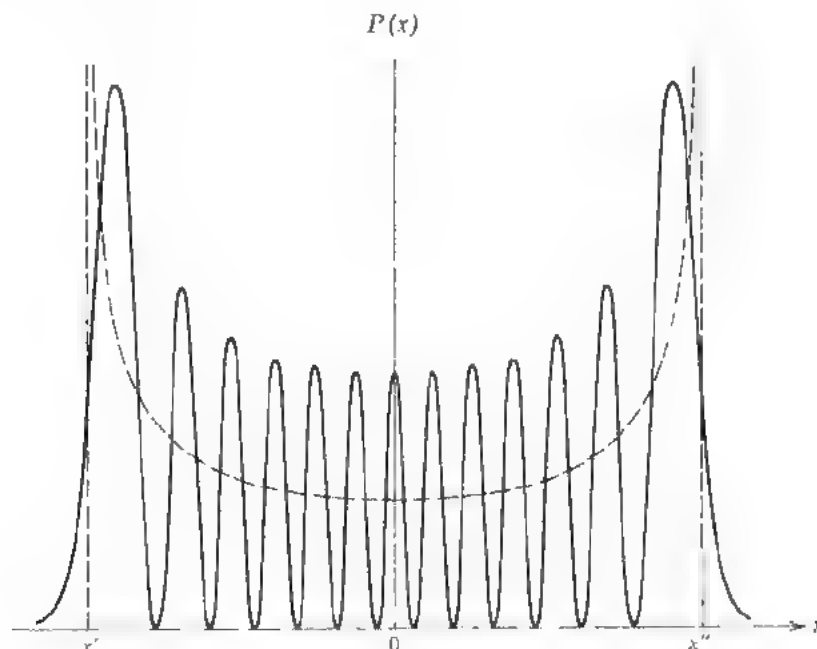
la eigenfunción ψ será una función oscilatoria en la región donde $[V(x) - E]$ es negativa ya que $d^2\psi/dx^2$ será negativa (cóncava hacia abajo) si ψ es positiva en esa región, mientras que $d^2\psi/dx^2$ será positiva (cóncava hacia arriba) si ψ es negativa en esa región. Sin embargo, ψ oscilará menos rápidamente en la proximidad de los extremos de la región que lo que lo hace en las cercanías del centro ya que la magnitud de $d^2\psi/dx^2$ que determina la rapidez de oscilación ψ es proporcional a la magnitud de $[V(x) - E]$ y la diferencia entre $V(x)$ y E se hace menor conforme se aproxima a los extremos de la región. Por lo tanto, la separación entre los nodos de la función oscilatoria aumenta en las vecindades de los extremos de la región en la manera indicada en la figura 5-18; la cual muestra la amplitud de las oscilaciones en ψ aumentando conforme se aproxima a los extremos de la región. La razón es que ψ se hará mayor en magnitud donde "se dobla", si $[V(x) - E]$ se hace menor en magnitud, para que $d^2\psi/dx^2$ que es proporcional a su producto, continúe teniendo una magnitud lo suficientemente grande para hacer que se doble. Obsérvese que la figura 5-18 indica que ψ se aproxima gradualmente al eje en el exterior de la región en la que $[V(x) - E]$ es negativa, tal como se requiere para una eigenfunción aceptable de un estado ligado. Obsérvese también que cuando ψ cruza los puntos en los que $[V(x) - E]$ cambia de signo, no tiene curvatura debido a que tanto esta cantidad como $d^2\psi/dx^2$ son cero en estos puntos.

La función densidad de probabilidad es esencialmente el cuadrado de ψ , y se indica por la curva sólida en la figura 5-19; en la misma figura la curva punteada indica la densidad de probabilidad que debería esperarse en la mecánica clásica para una partícula en movimiento armónico simple en el mismo potencial con la misma energía total. Como se discutió largamente en el ejemplo 5-6 la densidad de probabilidad clásica resulta relativamente grande cerca de los extremos de la región donde $[V(x) - E]$ es negativa puesto que la partícula se mueve más lentamente cerca de los extremos. En realidad la figura muestra las densidades de probabilidad según la mecánica clásica y según la mecánica cuántica, para un estado de energía E moderadamente grande (se trata de E_{13}) pero hace aparente la naturaleza de la correspondencia entre las densidades de probabilidad encontradas en el límite clásico de valores de E muy grandes (E_n cuando $n \rightarrow \infty$). En este límite la densidad de probabilidad mecánico cuántica fluctúa dentro de distancias tan pequeñas que solamente su comportamiento promedio, el cual está de acuerdo con la predicción clásica, se puede detectar experimentalmente. También en el límite clásico la densidad de probabilidad mecánico-cuántica no penetra una distancia mensurable fuera de la región en la que $[V(x) - E]$ es negativa

**FIGURA 5-18**

Eigenfunción para la decimotercera energía permitida del oscilador armónico simple. Los límites clásicos del movimiento están indicados por x' y x'' .

debido a que la distancia de penetración es comparable a la distancia en la cual fluctúa. Esto está de acuerdo con el corte tajante predicho por la densidad de probabilidad clásica. Para un oscilador armónico simple idealizado, $P(x)$ permanece proporcional a x^2 , aún para valores muy grandes de x^2 y por lo tanto todas las energías permitidas están separadas en forma discreta. ◀

**FIGURA 5-19**

La curva sólida es la función densidad de probabilidad para la decimotercera energía permitida del oscilador armónico simple. La curva punteada es la función densidad de probabilidad clásica para el movimiento armónico simple con la misma energía y es muy próxima al valor promedio de la función fluctuante mecánico-cuántica. Compare estas funciones para la primera energía permitida mostrada en la figura 5-3.

5.8 Resumen

Un sistema mecánico cuántico particular está descrito por una función de energía potencial particular. Se ha encontrado que si el potencial es independiente del tiempo, es decir si se puede escribir $V(x)$, la ecuación de Schrödinger para el potencial conduce inmediatamente a la correspondiente ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. También se ha encontrado que existen soluciones a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo solamente para ciertos valores de la energía, los cuales se enlistan en el orden de energía creciente como

$$E_1, E_2, E_3, \dots, E_n, \dots$$

A estas energías se les llama *eigenvalores* del potencial $V(x)$; un potencial particular tiene un conjunto particular de eigenvalores. Los primeros eigenvalores en la lista estarán separados discretamente en energía. Sin embargo, a menos que el potencial crezca sin límite tanto para valores muy grandes como para valores muy pequeños de x , los eigenvalores resultan distribuidos de manera continua en la energía más allá de cierto valor de ésta.

Correspondiendo a cada eigenvalor hay una *eigenfunción*

$$\psi_1(x), \psi_2(x), \psi_3(x), \dots, \psi_n(x), \dots$$

que es una solución a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el potencial $V(x)$

Para cada eigenvalor también existe una *función de onda* correspondiente

$$\Psi_1(x, t), \Psi_2(x, t), \Psi_3(x, t), \dots, \Psi_n(x, t), \dots$$

De (5-44) se sabe que estas funciones son

$$\psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar}, \psi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar}, \psi_3(x)e^{-iE_3t/\hbar}, \dots, \psi_n(x)e^{-iE_nt/\hbar}, \dots$$

Cada función de onda es una solución a la ecuación de Schrödinger para el potencial $V(x)$.

El índice n , que toma valores enteros sucesivos y que se utiliza para designar a un eigenvalor particular, su eigenfunción correspondiente y la función de onda, se denomina *número cuántico*. Si el sistema está descrito por la función de onda $\Psi_n(x, t)$, se dice que está en el *estado cuántico* n .

Cada una de las funciones de onda $\Psi_n(x, t)$ es una solución particular a la ecuación de Schrödinger para el potencial $V(x)$. Ya que esta ecuación es lineal en la función de onda, se espera que cualquier combinación lineal de estas funciones también sea solución. Esto se verificó en el ejemplo 5-2 para el caso de una combinación lineal de dos funciones de onda, pero la prueba se puede extender para mostrar que una combinación lineal arbitraria de *todas* las funciones de onda que son soluciones a la ecuación de Schrödinger para un potencial particular $V(x)$, es decir,

$$\Psi(x, t) = c_1\Psi_1(x, t) + c_2\Psi_2(x, t) + \dots + c_n\Psi_n(x, t) + \dots \quad (5-46)$$

también es solución a la ecuación de Schrödinger. De hecho esta expresión da la forma más general de la solución a la ecuación de Schrödinger para un potencial $V(x)$. Esto generalmente se puede apreciar observando que existe una función compuesta de un número muy grande de funciones diferentes combinadas en proporciones gobernadas por las constantes ajustables c_n .

Debe observarse que la ecuación de Schrödinger independiente de tiempo también es una ecuación lineal, pero en contraste con la ecuación de Schrödinger, contiene la energía total E en forma explícita. Por lo tanto, una combinación lineal arbitraria de soluciones diferentes satisfará la ecuación *solamente* si todas corresponden al mismo valor de E . En el capítulo siguiente se verá que existen dos soluciones

diferentes a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo que corresponden al mismo valor de E ya que la ecuación contiene una segunda derivada. También se verá que ambas soluciones no siempre son aceptables, aun para un valor permitido de E .

Ejemplo 5-13. Cuando una partícula se encuentra en un estado tal que una medida de su energía total sólo puede conducir a un resultado, el eigenvalor E , está descrita por la función de onda

$$\Psi = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$$

Un ejemplo (cuya tridimensionalidad no es importante aquí) sería un electrón en el estado base de un átomo de hidrógeno. En este caso, la función densidad de probabilidad

$$\Psi^*\Psi = \psi^*(x)e^{+iEt/\hbar}\psi(x)e^{-iEt/\hbar} = \psi^*(x)\psi(x)$$

no depende del tiempo. Considérese a una partícula en un estado tal que una medida de su energía total pudiera conducir a alguno de los dos resultados, el eigenvalor E_1 o el eigenvalor E_2 . Entonces la función de onda que describe a la partícula es

$$\Psi = c_1\psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar} + c_2\psi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar}$$

Un ejemplo podría ser el de un electrón que está en el proceso de efectuar una transición desde un estado excitado al estado base del átomo. Demostrar que en este caso la función densidad de probabilidad es una función oscilatoria en el tiempo y calcular la frecuencia de las oscilaciones.

Para la densidad de probabilidad se tiene

$$\Psi^*\Psi = [c_1^*\psi_1^*(x)e^{+iE_1t/\hbar} + c_2^*\psi_2^*(x)e^{+iE_2t/\hbar}][c_1\psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar} + c_2\psi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar}]$$

Multiplicando los dos términos entre paréntesis, se obtienen cuatro términos

$$\begin{aligned}\Psi^*\Psi &= c_1^*c_1\psi_1^*(x)\psi_1(x) + c_2^*c_2\psi_2^*(x)\psi_2(x) \\ &\quad + c_2^*c_1\psi_2^*(x)\psi_1(x)e^{i(E_2-E_1)t/\hbar} \\ &\quad + c_1^*c_2\psi_1^*(x)\psi_2(x)e^{-i(E_2-E_1)t/\hbar}\end{aligned}\tag{5-47}$$

En los primeros dos se cancela la dependencia temporal, pero no así en los dos últimos. Estos dos términos contienen exponenciales complejas que oscilan en el tiempo con frecuencia ν ; volviendo a escribir las exponenciales complejas como en (5-41a) y (5-41b), se ve inmediatamente que

$$\nu = \frac{E_2 - E_1}{2\pi\hbar} = \frac{E_2 - E_1}{h}\tag{5-48}$$

Acerca de los resultados del ejemplo 5-13 se pueden hacer comentarios muy interesantes. Considérese un electrón en el estado base de un átomo de hidrógeno; puesto que es posible localizar al electrón en cualquier parte donde la densidad de probabilidad tenga un valor apreciable, la carga portada no estará confinada a una región particular. Entonces, cuando se habla de las propiedades promedio del electrón en el átomo, resulta apropiado hablar de su distribución de carga, la cual es proporcional a su densidad de probabilidad. Puesto que la densidad de probabilidad en el estado base es independiente del tiempo, la distribución de carga también lo es. Pero aún en el electromagnetismo clásico una distribución de carga estática no emite radiación. Se ve que la mecánica cuántica proporciona una forma para resolver una paradoja de la teoría cuántica antigua respecto a la estabilidad, contra la emisión de radiación, de los átomos en sus estados base.

Los átomos que están excitados no emiten radiación y eventualmente regresan a su estado base. Considérese un electrón en el proceso de realizar una transición desde un estado excitado

al estado base de un átomo de hidrógeno. Su densidad de probabilidad y por lo tanto la distribución de carga asociada oscila en el tiempo con una frecuencia dada por (5-48)

$$\nu = \frac{E_2 - E_1}{h}$$

donde E_2 es la energía del estado excitado y E_1 es la energía del estado base. Según el electromagnetismo clásico debería esperarse que esta distribución de carga emitiera radiación con la misma frecuencia pero ésta es también precisamente la frecuencia del fotón que Bohr y Einstein afirman debería emitirse, ya que la energía transportada por el fotón es $E_2 - E_1$. Por supuesto que esto no puede ocurrir para un electrón en el estado base del átomo ya que *no* hay estado de menor energía para el estado base que se mezcle y produzca una densidad de probabilidad oscilatoria o distribución de carga.

Además de predecir correctamente las frecuencias de los fotones emitidos en transiciones atómicas, la mecánica cuántica también predice correctamente las probabilidades por segundo de que la transición ocurra. En el capítulo 8 se obtendrán estas predicciones mediante una extensión simple de los cálculos del ejemplo 5-13. Ahí se verá que las sorprendentes reglas de selección de la teoría cuántica antigua se siguen como una consecuencia inmediata de estas predicciones.

Schrödinger destacaba el hecho de que su teoría proporcionaba una descripción física del proceso de emisión de radiación por átomos excitados que era mucho más rica que la proporcionada por la teoría de Bohr. Al analizar las ventajas de su teoría él escribió: "Es sumamente necesario apuntar lo grato que sería concebir una transición cuántica como un cambio de energía entre un modo vibracional y otro, en vez de considerarla como un salto de electrones".

PREGUNTAS

1. ¿Por qué hay dificultades para aplicar el postulado de de Broglie $\lambda = h/p$, a una partícula cuyo impulso lineal cambia en magnitud?
2. ¿Cómo encaja el postulado de de Broglie en la teoría de Schrödinger?
3. ¿La evidencia experimental acerca de la aplicación de la relación $\nu = E/h$, de de Broglie-Einstein a las funciones de onda para partículas materiales es tan firme como la evidencia de que ésta se aplica a las ondas electromagnéticas y a los fotones? ¿La evidencia de que esta relación se aplica a las funciones de onda es tan firme como la evidencia de que $\lambda = h/p$ se aplica a las funciones de onda?
4. ¿Cuál sería el efecto sobre la teoría de Schrödinger si se cambiara la definición de energía total en la relación $\nu = E/h$ añadiéndole la constante de energía por masa en reposo de la partícula?
5. ¿Por qué la ecuación de Schrödinger no es válida para partículas relativistas?
6. ¿Newton derivó sus leyes de movimiento? ¿O las obtuvo de argumentos de plausibilidad?
7. Dar una razón por la cual la ecuación de Schrödinger se escribe en términos de la energía potencial y no en términos de la fuerza.
8. ¿Por qué es tan importante en la ecuación de Schrödinger el que la función de onda sea lineal?
9. La masa m de una partícula aparece explícitamente en la ecuación de Schrödinger pero no así su carga e a pesar de que ambas tienen efecto sobre su movimiento. ¿Por qué?
10. Las funciones de onda de la física clásica contienen una segunda derivada espacial y una segunda derivada temporal; la ecuación de Schrödinger contiene una segunda derivada espacial y una

primera derivada temporal. Utilice estos hechos para explicar por qué las soluciones a las ecuaciones de onda clásica pueden ser funciones reales, mientras que las soluciones a la ecuación de Schrödinger deben ser funciones complejas.

11. ¿Por qué la ecuación de Schrödinger contiene una primera derivada temporal?
12. Explique por qué no es posible medir el valor de una cantidad compleja.
13. En electromagnetismo se calcula la intensidad de una onda tomando el cuadrado de su amplitud. ¿Por qué no se hace exactamente lo mismo con las ondas mecánico-cuánticas?
14. Considérese una onda de agua que viaja por la superficie del océano. ¿Si nadie observa la onda y nadie piensa en ella, podría usted afirmar que la onda existe? ¿Daría usted automáticamente la misma respuesta para una onda mecánico-cuántica? si su respuesta es no explique por qué.
15. ¿Cuál es la conexión básica entre las propiedades de una función de onda y el comportamiento de la partícula asociada?
16. ¿Por qué la función densidad de probabilidad tiene que ser real, no negativa y de valor finito y definido en todas partes?
17. Explicar en palabras, qué se entiende por normalización de una función de onda.
18. Si no se aplica la condición de normalización ¿Cómo puede una función de onda multiplicarse por un factor constante y continuar siendo solución a la ecuación de Schrödinger?
19. ¿Por qué la mecánica cuántica de Schrödinger proporciona solamente información estadística? En su opinión, ¿esto refleja una falla de la teoría o una propiedad de la naturaleza?
20. Ya que la función de onda que describe el comportamiento de una partícula satisface una ecuación diferencial, su evolución en el tiempo es perfectamente predecible. ¿Cómo concuerda este hecho con el principio de incertidumbre?
21. Establecer en palabras el significado del valor de expectación de x .
22. ¿Por qué es necesario utilizar un operador diferencial para calcular el valor de expectación de p ?
23. ¿Existen otros ejemplos en ingeniería o matemáticas en los cuales los operadores diferenciales estén relacionados con cantidades físicas?
24. ¿Piensa usted que es legítimo decir que se ha *resuelto* una ecuación diferencial si se adivina la forma de la solución y posteriormente se verifica esta adivinanza por substitución?
25. Explicar brevemente el significado de una eigenfunción bien comportada con el contexto de la mecánica-cuántica de Schrödinger.
26. ¿Por qué una eigenfunción debe ser bien comportada para que sea aceptable en la teoría de Schrödinger?
27. Explicar en dos o tres frases por qué la energía de cuantización está relacionada con el carácter de buen comportamiento de las eigenfunciones aceptables.
28. ¿Por qué ψ es necesariamente una función oscilatoria si $V(x) < E$?
29. ¿Por qué ψ tiende a irse a infinito si $V(x) > E$?
30. ¿Siempre es posible para un valor permitido de la teoría total E de un sistema ser menor que el valor mínimo de su energía potencial $V(x)$? Dar un argumento cualitativo a lo largo de las líneas de los argumentos de la sección 5-7 para justificar su respuesta.
31. Se han visto varios ejemplos con el resultado de que el valor permitido más bajo para la energía total E

de una partícula ligada de un potencial $V(x)$, está por debajo del valor mínimo de $V(x)$. Utilizar el principio de incertidumbre en un argumento cualitativo para explicar por qué esto debe ser así.

32. Si una partícula no está ligada en un potencial su energía total no está cuantizada. ¿Esto significa que el potencial *no* tiene efecto en el comportamiento de la partícula? ¿Qué efectos esperaría usted que tuviera?

PROBLEMAS

1. Si las funciones de onda $\Psi_1(x, t)$, $\Psi_2(x, t)$, y $\Psi_3(x, t)$ son tres soluciones a la ecuación de Schrödinger para un potencial particular $V(x, t)$, demostrar que la combinación lineal arbitraria $\Psi(x, t) = c_1\Psi_1(x, t) + c_2\Psi_2(x, t) + c_3\Psi_3(x, t)$ también es solución de esta ecuación.
2. La dependencia de una función de onda con la posición para cierto instante se muestra en la figura 5-20. (a) Si en tal instante se hiciera una medición que pudiera localizar a la partícula asociada en un elemento dx del eje x , ¿dónde sería más probable encontrarla? (b) ¿Dónde sería menos probable encontrarla? (c) ¿Son mayores las probabilidades de encontrarla en *cualquier* valor positivo del eje x , o en *cualquier* valor negativo?
3. (a) Determinar la frecuencia ν de la parte dependiente del tiempo de la función de onda mencionada en el ejemplo 5-3, para el estado de energía más bajo de un oscilador armónico simple. (b) Utilice este valor de ν y la relación de Broglie-Einstein $E = h\nu$, para evaluar la energía total E del oscilador. (c) Utilice este valor de E para demostrar que los límites del movimiento clásico del oscilador, encontrados en el ejemplo 5-6, se pueden escribir como $x = \pm \hbar^{1/2}/(Cm)^{1/4}$.
4. Evaluando la integral clásica de normalización del ejemplo 5-6, determinar el valor de la constante B^2 que satisface el requisito de que la probabilidad total de encontrar a la partícula en alguna parte dentro de los límites del movimiento para el oscilador clásico debe ser igual a uno.
5. Utilizar los resultados del ejemplo 5-5, 5-6, y 5-7 para evaluar la probabilidad de encontrar a una partícula en el estado de energía más bajo de un oscilador armónico simple mecánico cuántico, dentro de los límites del movimiento clásico. (Sugerencia: (i) los límites clásicos del movimiento se expresan en una forma conveniente en el enunciado del problema 3c. (ii) La integral definida que se obtendrá se puede expresar como una integral de probabilidad o una función de error. Es posible evaluarla de inmediato consultando manuales matemáticos que tabulen estas cantidades. Alternativamente, se puede evaluar la integral definida graficándola en papel para gráficas y contando los cuadrados para encontrar el área encerrada entre el integrando, el eje y los límites).
6. A temperaturas suficientemente bajas, un átomo de una molécula diatómica vibrante es un oscilador armónico simple en su estado de energía más bajo, ya que está ligado a otro átomo por una fuerza restauradora lineal. (La fuerza restauradora es lineal, al menos aproximadamente, ya que las

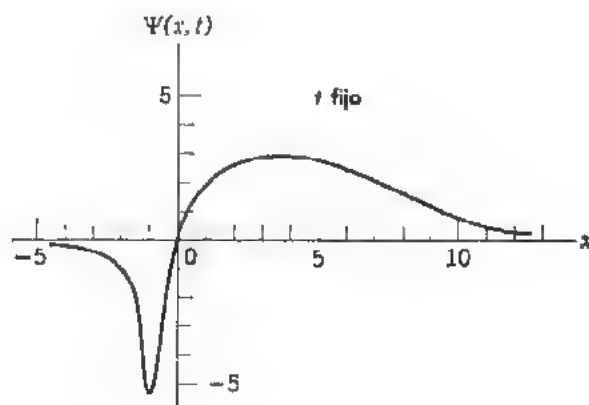


FIGURA 5-20

Dependencia espacial de una función de onda considerada en el problema 2, evaluada para cierto instante.

vibraciones moleculares son muy pequeñas). La constante de fuerza C para una molécula típica tiene un valor de aproximadamente $C \sim 10^3 \text{ nt/m}$. La masa del átomo es aproximadamente $m \sim 10^{-26} \text{ kg}$. (a) Utilice estos números para evaluar los límites del movimiento clásico a partir de la fórmula que aparece en el problema 3c. (b) Compare la distancia entre estos límites con las dimensiones de una molécula diatómica típica y comente lo que esta comparación implica en relación con el comportamiento de la molécula a temperaturas muy bajas.

7. Utilice la función de onda para la partícula en una caja verificada en el ejemplo 5-9, con el valor de A determinado en el ejemplo 5-10, para calcular la probabilidad de que la partícula asociada con la función de onda pueda ser encontrada en una medida dentro de una distancia de $a/3$ desde el extremo derecho de la caja de longitud a . La partícula está en su estado de energía más bajo. (b) Compare esto con la probabilidad que sería predicha por cálculos muy simples relacionados con lo hecho en el ejemplo 5-6.
8. Utilice los resultados del ejemplo 5-9 para estimar la energía total de un neutrón de masa aproximadamente 10^{-27} kg que se supone moviéndose libremente a través de un núcleo de dimensiones lineales de aproximadamente 10^{-14} m , pero que está estrictamente confinada al núcleo. Expresar la estimación en MeV. Esto estará muy próximo a la energía real de un neutrón en el estado de energía más bajo de un núcleo típico.
9. (a) Siguiendo el procedimiento del ejemplo 5-9, verificar que la función de onda

$$\Psi(x,t) = \begin{cases} A \sin \frac{2\pi x}{a} e^{-iEt/\hbar} & -a/2 < x < +a/2 \\ 0 & x < -a/2 \text{ o } x > +a/2 \end{cases}$$

es una solución a la ecuación de Schrodinger en la región $-a/2 < x < +a/2$ para una partícula que se mueve libremente a través de la región pero que se encuentra estrictamente confinada a ella. (b) Determine también el valor de la energía total E de la partícula en el primer estado excitado del sistema y compárela con la energía total del estado base que se encontraron en el ejemplo 5-9. (c) Graficar la dependencia espacial de esta función de onda. Compararla con la función de onda para el estado base de la figura 5-7 y dar un argumento cualitativo que relacione la diferencia en las dos funciones de onda con la diferencia en las energías totales de los dos estados.

10. (a) Normalizar la función de onda del problema 9 ajustando el valor de la constante multiplicativa A de modo que la probabilidad total de encontrar a la partícula asociada en alguna parte de la región de longitud a sea igual a uno. (b) Comparar con el valor de A que se obtuvo en el ejemplo 5-7 normalizando la función de onda del estado base. Discuta la comparación.
11. Calcular el valor de expectación de x y el valor de expectación de x^2 para la partícula asociada con la función de onda del problema 10.
12. Calcular el valor de expectación de p y el valor de expectación de p^2 para la partícula asociada con la función de onda del problema 10.
13. (a) Utilizar las cantidades calculadas en los dos problemas anteriores para calcular el producto de las incertidumbres en posición e impulso de la partícula en el primer estado excitado del sistema en consideración. (b) Comparar con la incertidumbre del producto cuando la partícula está en el estado de energía más bajo del sistema, obtenido en el ejemplo 5-10. Explicar por qué difieren las incertidumbres de los productos.
14. (a) Calcular los valores de expectación de la energía cinética y de la energía potencial para una partícula en el estado de energía más bajo de un oscilador armónico simple, utilizando la función de onda del ejemplo 5-7. (b) Comparar con los promedios temporales de las energías cinética y potencial para un oscilador armónico simple clásico de la misma energía total.
15. Al calcular los valores de expectación del producto de la posición por el impulso, surge una ambigüedad debido a que no es trivial cuál de las dos expresiones

$$\overline{xp} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi dx$$

$$\overline{px} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) x \Psi dx$$

se debe utilizar. (En la primera expresión $\partial/\partial x$ opera sobre Ψ ; en la segunda opera sobre $x\Psi$) (a) demostrar que ninguna es aceptable porque ambas violan el requisito, obvio de que \overline{xp} debe ser real ya que es mensurable. (b) entonces, demuestre que la expresión

$$\overline{xp} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \left[\frac{x \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) + \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) x}{2} \right] \Psi dx$$

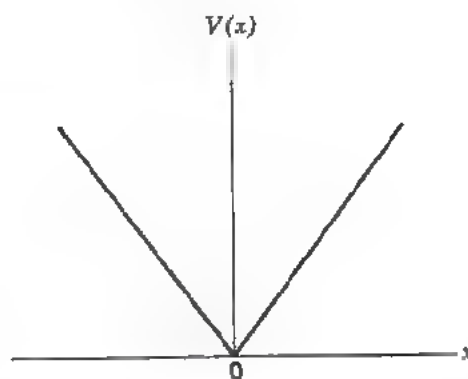
es aceptable ya que satisface este requisito. (Sugerencia: (i) una cantidad es real si es igual a su propio complejo conjugado. (ii) Intente integrar por partes. (iii) En un caso real la función de onda se anulará siempre en $x = \pm \infty$.)

16. Demostrar por substitución directa en la ecuación de Schrödinger que la función de onda

$$\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$$

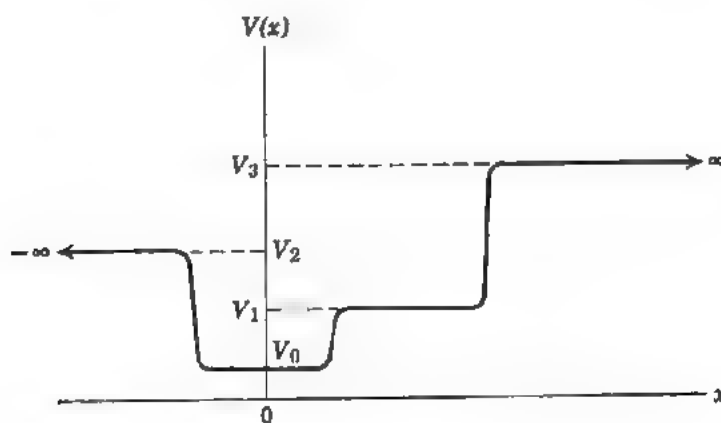
satisface la ecuación si la eigenfunción $\psi(x)$ satisface la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para un potencial $V(x)$.

17. (a) Escribir la ecuación de onda clásica para una cuerda cuya densidad por unidad de longitud varía con x . (b) Separarla en dos ecuaciones diferenciales ordinarias y demostrar que la ecuación en x es muy similar a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.
18. Utilizar una extensión del procedimiento que condujo a (5-31) y obtener la ecuación de Schrödinger para una partícula de masa m que se mueve en tres dimensiones (descritas por coordenadas rectangulares x, y, z).
19. (a) Separar la ecuación de Schrödinger del problema 18 para un potencial independiente del tiempo en una ecuación de Schrödinger independiente del tiempo y una ecuación para la dependencia temporal de la función de onda. (b) Comparar las ecuaciones unidimensionales correspondientes (5-37) y (5-38) y explicar las similitudes y las diferencias.
20. (a) Separar la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo del problema 19 en tres ecuaciones de Schrödinger independientes del tiempo, una en cada una de las coordenadas (b) Compararlas con (5-37) (c) Explicar claramente qué se debe suponer acerca de la forma de la energía potencial para hacer posible la separación y cuál es el significado físico de esta suposición. (d) Dar un ejemplo de un sistema que pueda tener tal potencial.
21. Considere una partícula que se mueve bajo la influencia del potencial $V(x) = C|x|$, donde C es una constante, el potencial se ilustra en la figura 5-21. (a) Utilice argumentos cualitativos, muy similares a los del ejemplo 5-12, para hacer un esquema de las primeras eigenfunciones y de los diez eigenvalores para el sistema. (b) Hacer un esquema de las funciones de densidad de probabilidad correspondientes. (c) Utilizar la mecánica clásica para calcular, a la manera del ejemplo 5-6, las funciones densidad de probabilidad predichas por esa teoría. (d) Graficar las funciones densidad de probabilidad clásicas con las funciones densidad de probabilidad mecánico-cuánticas y discutir brevemente su comparación.

**FIGURA 5-21**

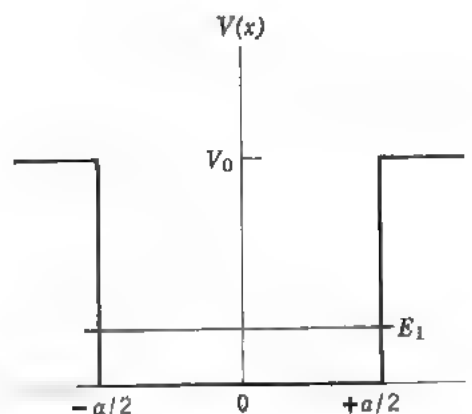
Función potencial considerada en el problema 21.

22. Considere una partícula que se mueve en el potencial $V(x)$ representado en la figura 5-22. Para los siguientes intervalos de la energía total E , establecer si existen algunos valores permitidos para E y, de haberlos, decir si ellos están separados discretamente o distribuidos de manera continua. (a) $E < V_0$, (b) $V_0 < E < V_1$, (c) $V_1 < E < V_2$, (d) $V_2 < E < V_3$, (e) $V_3 < E$.

**FIGURA 5-22**

Función potencial considerada en el problema 22.

23. Considere una partícula que se mueve en el potencial $V(x)$ ilustrado en la figura 5-23, que tiene una región rectangular de profundidad V_0 y ancho a , en el cual se encuentra ligada la partícula. Estos parámetros están relacionados con la masa m de la partícula de tal manera que la energía permitida más baja E_1 se encuentra a una energía cercana a $V_0/4$ por encima del "fondo". Utilice argumentos cualitativos para graficar la forma aproximada de la eigenfunción correspondiente

**FIGURA 5-23**

Función potencial considerada en el problema 23.

24. Supóngase que el fondo de la función potencial del problema 23 se cambia añadiendo una protuberancia en el centro de altura aproximada $V_0/10$ y ancho $a/4$. Esto es, suponga que ahora el potencial luce como la ilustración de la figura 5-24. Considere cualitativamente qué sucederá a la curvatura de la eigenfunción en la región de la protuberancia y cómo afectará ésta el problema de obtener un comportamiento aceptable de la eigenfunción en la región externa a la región ligante. A partir de estas consideraciones prediga cualitativamente qué le hará la protuberancia al valor de la energía más baja permitida E_1 .

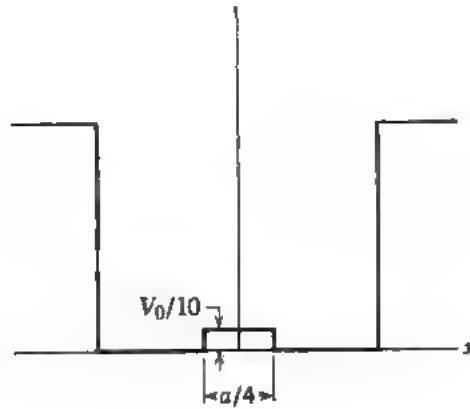


FIGURA 5-24

Protuberancia rectangular añadida al fondo del potencial de la figura 5-23.

25. Ya que la protuberancia en el problema 24 es pequeña, una buena aproximación a la energía más baja permitida de la partícula en presencia de la protuberancia se puede obtener tomándola como la suma de la energía en ausencia de la protuberancia más el valor de expectación de la energía potencial extra representada por la protuberancia, tomando la Ψ correspondiente al potencial sin protuberancia para calcular el valor de expectación. Utilizando este punto de vista, prediga si una protuberancia del mismo "tamaño" pero localizada en un extremo del fondo como en la figura 5-25 tendría un efecto mayor, menor o igual sobre la menor energía permitida para la partícula, comparado con el efecto de la protuberancia centrada. (Sugerencia: haga un bosquejo del producto de $\Psi^*\Psi$ y la función energía potencial que describe a la protuberancia centrada. A continuación considere cualitativamente el efecto sobre la integral de este producto, de mover al extremo la protuberancia.
26. Demuestre por substitución en la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el potencial ilustrado en la figura 5-23, que en la región a la derecha de la región de enlace la eigenfunción tiene la forma matemática

$$\psi(x) = Ae^{-[\sqrt{2m(V_0-E)}/\hbar]x} \quad x > +a/2$$

27. Utilizando la densidad de probabilidad correspondiente a la eigenfunción del problema 26, escriba una expresión para estimar la distancia D externa a la región de enlace del potencial

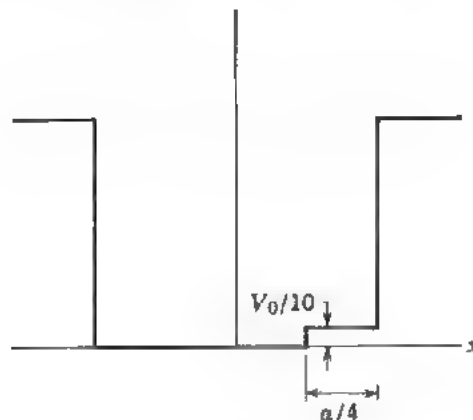


FIGURA 5-25

La misma protuberancia de la figura 5-24 pero movida al extremo del potencial.

dentro de la cual existe una gran probabilidad de encontrar a la partícula. (Sugerencia: considere que D se extiende hasta el punto en el cual $\Psi^*\Psi$ es menor que su valor en el extremo de la región de enlace por un factor de e^{-1} . Este criterio de e^{-1} es similar al que se utiliza en el estudio de los circuitos eléctricos).

28. El potencial ilustrado en la figura 5-23 da una buena descripción de las fuerzas que actúan sobre un electrón que se mueve a través de un bloque de metal. La diferencia de energía $V_0 - E$, para la energía del electrón más alta, es la función trabajo para el metal. Típicamente, $V_0 - E \approx 5 \text{ eV}$. (a) Utilice este valor para estimar la distancia D del problema 27. (b) Comente los resultados de la estimación.
29. Considere la eigenfunción mostrada en la parte superior de la figura 5-26. (a) ¿Cuál de los tres potenciales ilustrados en la parte inferior de la figura podría conducir a tal eigenfunción? Proporcione argumentos cualitativos para justificar su respuesta. (b) La eigenfunción mostrada no es la que corresponde al estado de energía más bajo permitido para el potencial. Haga un esquema de la forma de la eigenfunción que corresponde a la menor energía permitida. (c) En otro esquema indique el rango de energía en el que esperaría que los estados de energía estuvieran separados discretamente y el rango de energías en los que esperaría que las energías permitidas se encuentren distribuidas de manera continua.
30. (a) Utilice el procedimiento de integración numérica desarrollado en el apéndice F para encontrar el valor de la energía más baja permitida E_1 y la forma de la eigenfunción correspondiente $\psi_1(x)$, para una partícula de masa m que se mueve en el potencial

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < -a/2 \text{ o } x > +a/2 \\ 0 & -a/2 < x < +a/2 \end{cases}$$

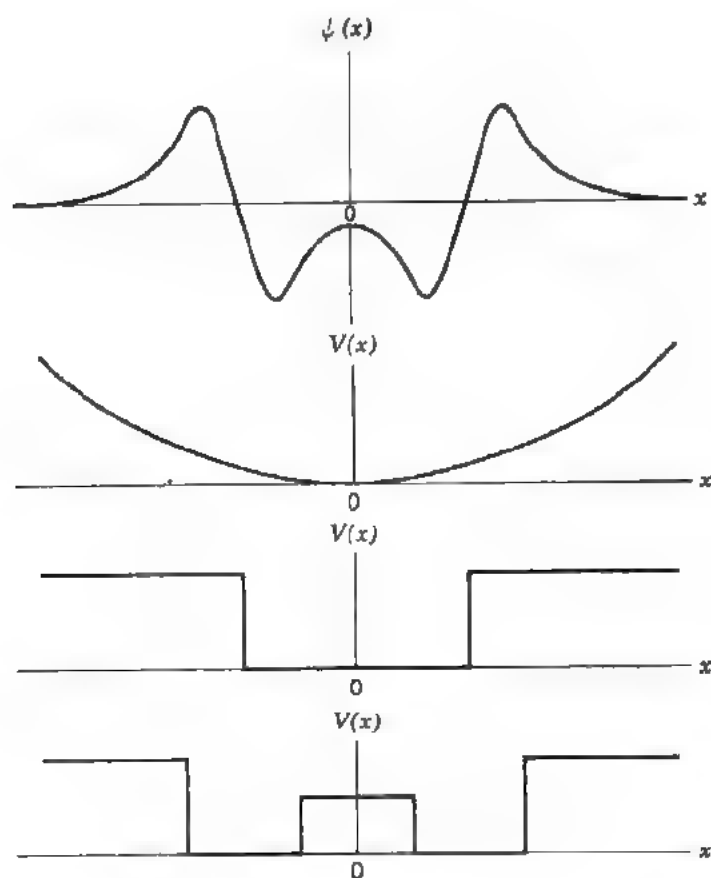


FIGURA 5-26

Una eigenfunción (curva superior) y tres posibles formas (curvas inferiores) para la función energía potencial considerada en el problema 29.

Como se demostró en el capítulo 6, puesto que $V(x)$ aumenta sin límite cuando x está fuera de la región de longitud a , la partícula está impedida de encontrarse fuera de esta región. Por lo tanto $\psi_1(x)$ se va a cero para $x = \pm a/2$. Argumentos de simetría muestran que para la función más baja $d\psi_1(x)/dx$ es cero para $x = 0$. (Sugerencia: en este problema no es posible definir al parámetro α pero es posible definir al parámetro C directamente en términos de E_1) (b) Comparar el valor de E_1 que se obtuvo, con la solución exacta para este problema que se obtuvo analíticamente en el ejemplo 5-9.

31. Hacer el mismo cálculo indicado en el problema 30, excepto por un potencial que contiene una protuberancia rectangular de altura v_0 y ancho $a/2$ centrada en el fondo de la región de enlace. Esto

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < -a/2 \text{ o } x > +a/2 \\ 0 & -a/2 < x < -a/4 \text{ o } +a/4 < x < +a/2 \\ v_0 & -a/4 < x < +a/4 \end{cases}$$

Tome v_0 con el valor

$$v_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}$$

En el problema 17 del capítulo siguiente se pregunta la solución analítica a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para este potencial. (Sugerencia: a partir de consideraciones cualitativas del problema 24 se puede obtener una guía sobre la elección inicial apropiada para E_1).

32. Repetir la integración numérica del apéndice F para los valores supuestos de E de mayor energía y encontrar el primer estado excitado del potencial tratado ahí. (Sugerencia: (i) Para este estado $\psi = 0$ en $u = 0$. (ii) Tome $d\psi/du = +1$ en este punto, ya que la linealidad permite tener cualquier valor. (iii) La eigenfunción luce como una onda senoidal que llena la región del pozo).
33. Utilizando las primeras dos funciones de onda normalizadas $\Psi_1(x,t)$ y $\Psi_2(x,t)$ para una partícula que se mueve libremente en una región de longitud a , pero confinada estrictamente a esta región, construya la combinación lineal

$$\Psi(x,t) = c_1 \Psi_1(x,t) + c_2 \Psi_2(x,t)$$

Derive una relación que incluya las constantes ajustables c_1 y c_2 las cuales aseguran que $\Psi(x,t)$ también está normalizada. En el ejemplo 5-10 y en el problema 10 se han obtenido $\Psi_1(x,t)$ y $\Psi_2(x,t)$ normalizadas.

34. (a) Utilizando las funciones de onda "mezcladas" normalizadas del problema 33, calcular el valor de expectación de la energía total E de la partícula en términos de las energías E_1 y E_2 de los dos estados y de los valores c_1 y c_2 de los parámetros de mezcla. (b) Interpretar cuidadosamente el significado de su resultado.
35. Si la partícula descrita por la función de onda del problema 33 es un protón que se mueve en un núcleo, dará lugar a una distribución de carga que oscila en el tiempo con la misma frecuencia que las oscilaciones de su densidad de probabilidad. (a) Evaluar esta frecuencia para los valores de E_1 y E_2 correspondientes a una masa de protón de 10^{-27} kg y una dimensión nuclear de 10^{-14} m. (b) Evaluar también la frecuencia y la energía del fotón que emitiría esta distribución de carga oscilante cuando el protón cayera de su estado excitado a su estado base. (c) ¿En qué región del espectro electromagnético está este fotón?

Soluciones a las ecuaciones de Schrödinger independientes del tiempo

6.1	Introducción	217
	Papeles que desempeñan los potenciales ligados y no ligados.	
6.2	El potencial cero	218
	Movimiento clásico en el potencial; solución general de la ecuación; interpretación de las eigenfunciones y de las funciones de onda de ondas viajeras senoidales; normalización en una caja; grupo de ondas viajeras; ley de Newton a partir de la ecuación de Schrödinger.	
6.3	El potencial escalón (energía menor que la altura del escalón).	224
	Movimiento clásico; eigenfunción general para la región bajo el escalón; finitud; condiciones de continuidad en el escalón; coeficiente de reflexión; penetración bajo el escalón; límite clásico; distancias de penetración para partículas materiales y electrones de conducción.	
6.4	El potencial escalón (energía mayor que la altura del escalón).	234
	Movimiento clásico; ausencia de onda reflejada en la región sobre el escalón; condiciones de continuidad; coeficientes de reflexión y de transmisión; límite clásico; reflexión de un neutrón que penetra al núcleo.	
6.5	Barrera de potencial	240
	Movimientos clásicos; procedimientos para la solución; densidad de probabilidad de penetración de la barrera y coeficiente de transmisión; tunelaje y coeficiente de transmisión al pasar sobre la barrera; dispersión electrón-átomo, efecto Ramsauer y tamaños de las resonancias; comparación entre la barrera y el escalón; reflexión total interna frustrada y penetración de la barrera.	

216	ECUACIONES DE SCHRODINGER INDEPENDIENTES DEL TIEMPO	Cap. 6
6.6	Ejemplos de penetración de barrera por partículas	247
	Potencial partícula α -núcleo; emisión α ; teoría Gamow-Condon-Gurney del decaimiento α ; inversión de la molécula de amonio y relojes atómicos; diodos túnel.	
6.7	Potencial de pozo cuadrado	251
	Movimiento clásico; sistemas aproximados por un potencial; procedimientos para la solución; eigenvalores y eigenfunciones; límite clásico; el pozo cuadrado infinito como límite.	
6.8	El potencial de pozo cuadrado infinito	257
	Sistemas aproximados por un potencial; solución; eigenvalores; energía del punto cero y su relación con el principio de incertidumbre; eigenfunciones; aplicación directa de la relación de de Broglie; electrón ligado en el núcleo; paridad de las eigenfunciones; límite clásico.	
6.9	El potencial de oscilador armónico simple	265
	Vibraciones pequeñas; movimiento clásico; procedimiento para la solución; eigenvalores y energía del punto cero; eigenfunciones y paridad.	
6.10	Resumen	269
	Tabla de propiedades de los potenciales estudiados.	
	Preguntas	269
	Problemas	271

Soluciones a las ecuaciones de Schrödinger independientes del tiempo

6.1 Introducción

En este capítulo se analizarán muchas predicciones interesantes acerca de los fenómenos de la mecánica cuántica. También se estudiarán algunos de los experimentos que confirmaron estas predicciones y algunas de las aplicaciones prácticas e importantes de los fenómenos. Las predicciones se obtendrán de: resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para diferentes formas de la función de energía potencial $V(x)$, determinar las eigenfunciones, los eigenvalores, las funciones de onda y a continuación utilizar los procedimientos desarrollados en los capítulos anteriores para interpretar el significado físico de estas cantidades.

El enfoque será sistemático. Se empezará por tratar la forma más simple para el potencial, $V(x) = 0$. A continuación y en forma gradual se añadirá complejidad al potencial. Con cada nuevo potencial que se trate, el estudiante obtendrá una nueva visión de la mecánica cuántica y del comportamiento de los sistemas microscópicos. En este proceso el estudiante empezará a desarrollar una intuición para la mecánica cuántica, de la misma manera que desarrolló una intuición para la mecánica clásica mediante el uso repetido de la teoría.

Los potenciales considerados en las primeras secciones de este capítulo no tienen capacidad de ligar a una partícula, ya que no existe una región en la que tengan una depresión. A pesar de que en estos potenciales no se obtendrá una cuantización de la energía, se obtendrán otros fenómenos fundamentales. Además del hecho de que estos potenciales llenan de manera natural el inicio del enfoque sistemático existe otra razón para tratar primero a los potenciales no enlazantes y es que probablemente la mitad del trabajo *frecuente* que se realiza en la mecánica cuántica tiene que ver con partículas no ligadas.

Sin embargo, es cierto que la mayoría de las aplicaciones *iniciales* de la mecánica cuántica fueron sobre partículas ligadas. Muchos de los aspectos de la estructura de los átomos, moléculas y sólidos son ejemplos de problemas de partículas ligadas, lo mismo que muchos aspectos de la estructura nuclear. Ya que estos son los tópicos en los que nos concentraremos en los siguientes capítulos de este libro, algunos estudiantes (o instructores) preferirán ir directamente a la sección 6-7 que es el primer tratamiento de los potenciales enlazantes, o a la sección 6-8 que trata de un caso especial importante. Estas secciones son lo suficientemente autoconsistentes como para hacer los cortes mencionados sin mucha dificultad.

A través de este capítulo solamente se tratará con potenciales independientes del tiempo, ya que sólo para esos potenciales la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo tiene significado. El análisis se restringirá a una sola dimensión ya que esto simplifica las matemáticas, permitiendo demostrar más de los interesantes fenómenos cuánticos. Excepciones obvias son los fenómenos que incluyen el impulso angular ya que éste no tiene significado en una

dimensión. Puesto que el impulso angular juega un papel preponderante en la estructura atómica, el capítulo siguiente comienza por extender este desarrollo de la mecánica cuántica a tres dimensiones.

6.2 El potencial cero

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo más simple es aquella en la cual $V(x) = \text{constante}$. Una partícula que se mueve bajo la acción de tal potencial es una *partícula libre* ya que la fuerza que actúa sobre ella es $F = -dV(x)/dx = 0$. Como esto es cierto sin importar el valor de la constante, no se pierde generalidad al escoger arbitrariamente la constante aditiva que aparece siempre en la definición de una energía potencial, de tal forma que se obtenga

$$V(x) = 0 \quad (6-1)$$

se sabe que en *mecánica clásica* una partícula libre debe estar o en reposo o en movimiento con impulso constante p . En cualquier caso su energía total E es una constante.

Para encontrar el comportamiento predicho por la *mecánica cuántica* para una partícula libre, se resuelve la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (5-43), haciendo $V(x) = 0$. Con esta expresión para el potencial la ecuación es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \quad (6-2)$$

Las soluciones son las eigenfunciones $\psi(x)$, y las funciones de onda $\Psi(x, t)$ son, de acuerdo a (5-44)

$$\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar} \quad (6-3)$$

Los eigenvalores E son iguales a la energía total de la partícula. Se sabe del análisis cualitativo de la sección 5-7 que para este potencial no enlazante y para cualquier valor de $E \geq 0$ existirá una solución aceptable de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.

Por supuesto que de los argumentos de plausibilidad que condujeron a la ecuación de Schrödinger ya se sabe una forma para la función de onda de una partícula libre. Esa función de onda (5-23) es

$$\Psi(x, t) = \cos(kx - \omega t) + i \sin(kx - \omega t)$$

Volviendo a escribirla como una exponencial compleja se tiene

$$\Psi(x, t) = e^{i(kx - \omega t)} \quad (6-4a)$$

El número de onda k y la frecuencia angular ω son

$$k = \frac{p}{\hbar} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \text{y} \quad \omega = \frac{E}{\hbar} \quad (6-4b)$$

Escribiendo la exponencial como el producto de dos factores

$$\Psi(x, t) = e^{ikx}e^{-i\omega t} = e^{ikx}e^{-iEt/\hbar}$$

Y comparándola con la forma general de la función de onda (6-3)

$$\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$$

Se obtiene

$$\psi(x) = e^{ikx} \quad \text{donde } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (6-5)$$

Es decir, la exponencial compleja de (6-5) da la forma de una eigenfunción de una partícula libre que corresponde al eigenvalor E .

En forma más específica, ésta es una onda viajera eigenfunción de partícula libre, ya que la función de onda correspondiente $\Psi(x,t) = e^{i(kx - \omega t)}$, representa una onda viajera. Esto se puede ver, por ejemplo, del hecho de que los nodos de la parte real de la función de onda oscilatoria están localizados en posiciones en las que $kx - \omega t = (n + 1/2)\pi$, con $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. La razón es que la parte real de $\Psi(x,t)$, que es $\cos(kx - \omega t)$, tiene el valor cero siempre que $kx - \omega t = (n + 1/2)\pi$. Y por lo tanto los nodos ocurren siempre que $x = (n + 1/2)\pi/k + \omega t/k$ y puesto que los valores de x crecen al crecer t , los nodos viajan en la dirección en la que crece x . Esta conclusión se muestra en la parte superior de la figura 6-1 la cual muestra la gráfica de la parte real de $\Psi(x,t)$ para tiempos posteriores sucesivos. Para esta función de onda la densidad de probabilidad $\Psi^*(x,t)\Psi(x,t)$, que se ilustra en la parte inferior de la figura 6-1 no tiene significado en cuanto al movimiento.

La intuición sugiere que para el mismo valor de E también deberá existir una función de onda que represente a una onda que viaja en la dirección en la que decrece x . El argumento anterior indica que esta función de onda deberá escribirse con el signo de kx invertido, es decir

$$\Psi(x,t) = e^{i(-kx - \omega t)} \quad (6-6)$$

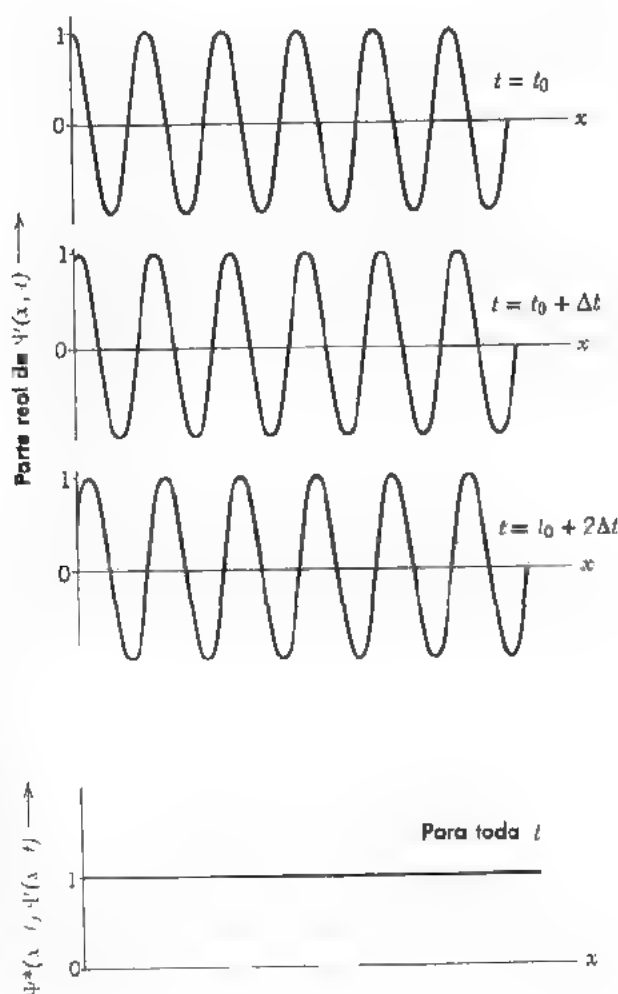


FIGURA 6-1

Arriba: Parte real, $\cos(kx - \omega t)$, de una exponencial compleja como función de onda viajera, $\Psi = e^{i(kx - \omega t)}$, para una partícula libre. Al aumentar el tiempo los nodos se mueven en la dirección en la que crece x . Abajo: Para esta función de onda no se ha convenido ningún sentido para el movimiento al representar la densidad de probabilidad $\Psi^*\Psi = e^{-i(kx - \omega t)}e^{i(kx - \omega t)} = 1$ ya que es constante para toda t (y para toda x). Por supuesto que no es posible representar Ψ ya que es compleja.

La eigenfunción correspondiente será

$$\psi(x) = e^{-ikx} \quad \text{donde } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (6-7)$$

Es fácil ver que esta eigenfunción también es solución de la ecuación de Schrodinger independiente del tiempo para $V(x) = 0$. En efecto, cualquier combinación lineal arbitraria de las dos eigenfunciones (6-5) y (6-7), para el mismo valor de la energía total E , también es solución a la ecuación. Para probar esta afirmación se tomará la combinación lineal

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad \text{donde } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (6-8)$$

en la cual A y B son constantes arbitrarias y substituyéndola en la ecuación de Schroedinger independiente del tiempo (6-2). Puesto que

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = i^2k^2Ae^{ikx} + i^2k^2Be^{-ikx} = -k^2\psi(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x)$$

la substitución en la ecuación conduce a

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\frac{2mE}{\hbar^2}\right)\psi(x) = E\psi(x)$$

y puesto que obviamente esta se satisface, la combinación lineal es una solución válida de la ecuación de Schrodinger independiente del tiempo.

La forma más general de la solución de una ecuación diferencial ordinaria (es decir, no parcial) que contenga una segunda derivada, tiene dos constantes arbitrarias. La razón es que para obtener la solución de esa ecuación hay que desarrollar dos integraciones sucesivas y en cada paso aparece una constante de integración. Los ejemplos más familiares al estudiante se encuentran en las soluciones generales de la ecuación de Newton del movimiento, las cuales tienen dos constantes arbitrarias tales como la posición y velocidad inicial. Puesto que la combinación lineal de (6-8) es una solución a (6-2) que contiene dos constantes arbitrarias es una solución *general*. La solución general es útil porque permite describir *cualquier* eigenfunción posible asociada con el eigenvalor E . Por ejemplo, si se hace $B = 0$ se obtiene una eigenfunción para una onda que viaja en la dirección en la que crece x . Si se hace $A = 0$ la onda viaja en la dirección en la que x decrece. Si se hace $|A| = |B|$, existen dos ondas que viajan en direcciones opuestas y que se combinan para formar una onda estacionaria. En la sección 6-3 se utilizarán eigenfunciones que son ondas estacionarias.

Considérese ahora la cuestión de dar interpretación física a las eigenfunciones y funciones de onda de la partícula libre. Tómese primero el caso de una onda que viaja en la dirección en la que crece x . La eigenfunción y la función de onda para este caso son

$$\psi(x) = Ae^{ikx} \quad \text{y} \quad \Psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)} \quad (6-9)$$

Una conjetura obvia es que la partícula cuyo movimiento está descrito por estas funciones también viaja en la dirección en la que x crece. Para verificarlo, se calculará el valor de expectación del impulso p de la partícula. De acuerdo con la fórmula general para el valor de expectación (5-34)

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* p_{op} \Psi dx$$

onde el operador para el impulso es

$$p_{op} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

Ahora, para la función de onda en cuestión, se tiene

$$p_{op}\Psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} Ae^{i(kx-\omega t)} = -i\hbar(ik)Ae^{i(kx-\omega t)} = +\hbar k\Psi = +\sqrt{2mE}\Psi$$

Así

$$\bar{p} = + \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \sqrt{2mE} \Psi dx = +\sqrt{2mE} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi dx$$

La integral del segundo miembro es la densidad de probabilidad integrada sobre todo el eje x y es justamente la probabilidad de que la partícula se encuentre en alguna parte, lo cual deberá ser igual a uno. Por lo tanto, se obtiene

$$\bar{p} = +\sqrt{2mE}$$

Que es exactamente el impulso que debería esperarse para una partícula que se mueve en la dirección en la que crece x con una energía total E en una región de energía potencial cero.

Para el caso de una onda que viaja en la dirección en la que decrece x , la eigenfunción y la función de onda son

$$\psi(x) = Be^{-ikx} \quad \text{y} \quad \Psi(x,t) = Be^{i(-kx-\omega t)} \quad (6-10)$$

Cuando se opera sobre Ψ con p_{op} , se invierte el signo del término kx de la expresión anterior lo cual produce un signo cambiado en el resultado. Por lo tanto, se tiene el siguiente valor de expectación para el impulso.

$$\bar{p} = -\sqrt{2mE}$$

De esta manera, la función de onda y la eigenfunción se interpretan como descripción del movimiento de una partícula que se mueve en la dirección en la que decrece x con un impulso negativo y cuya magnitud es la que se esperaría en consideración a su energía.

Las eigenfunciones y las funciones de onda que se han considerado representan las situaciones idealizadas de una partícula en movimiento, en una dirección o en la otra, en un haz de longitud infinita. Su coordenada x es completamente desconocida debido a que las amplitudes de las ondas son las mismas en todas las regiones del eje x . Esto es, las densidades de probabilidad, por ejemplo

$$\Psi^*\Psi = A^*e^{-i(kx-\omega t)}Ae^{i(kx-\omega t)} = A^*A$$

son constantes independientes de x . En consecuencia, la partícula se encontrará igualmente en cualquier punto y la incertidumbre en su posición es $\Delta x = \infty$. El principio de incertidumbre establece que en esta situación es posible conocer con completa precisión el valor del impulso p de la partícula, por lo tanto

$$\Delta p \Delta x \geq \hbar/2$$

se puede satisfacer para una incertidumbre en su impulso de $\Delta p = 0$, si $\Delta x = \infty$. Los valores de p perfectamente precisos también están indicados por la relación de de Broglie, $p = \hbar k$, ya que

estas funciones de onda solamente contienen un solo valor del número de onda k . Puesto que existe una cantidad infinita de tiempo disponible para medir la energía de una partícula que viaja a través de un haz de longitud infinita, el principio de incertidumbre energía-tiempo $\Delta E \Delta t \geq \hbar/2$ permite que su energía se conozca con completa precisión. Esto concuerda con la presencia de un solo valor de la frecuencia angular ω en estas funciones de onda, ya que la relación de Einstein-de Broglie $E = \hbar\omega$ muestra que esto significa un solo valor de la energía E .

Un ejemplo físico que se aproxima a la situación idealizada que representan estas funciones de onda sería el de un protón que se mueve en un haz altamente monoenergético que emerge de un ciclotrón. Estos haces se utilizan para estudiar la dispersión de protones por blancos de núcleos insertados en el haz. Desde el punto de vista del núcleo blanco y en términos de las distancias del orden de su radio nuclear r' , la posición x de un protón en el haz será para todos los fines prácticos completamente desconocida, es decir $\Delta x \gg r'$. Entonces las funciones de onda de partícula libre (6-9) y (6-10) pueden dar una buena aproximación a la descripción de haz de protones en la región cercana al núcleo que nos interesa, en la que tiene lugar la dispersión. En otras palabras, en las proximidades del núcleo la función de onda (6-9)

$$\Psi = Ae^{i(kx - \omega t)}$$

se puede usar para describir a un protón en un haz de un ciclotrón dirigido hacia donde crece x , tomando en cuenta que el haz es extremadamente largo comparado con las dimensiones del núcleo (condición que siempre se satisface en la práctica ya que los núcleos son extremadamente pequeños). La función de onda describe una partícula que se mueve con un impulso $p = \hbar k$ (preciso) y su energía total $E = \hbar\omega$, (precisa), donde estas cantidades están relacionadas por la ecuación $p = \sqrt{2mE}$ que es la de una partícula de masa m que se mueve en una región de energía potencial cero.

Existe una dificultad en cuanto a la normalización de las funciones de onda (6-9) y (6-10). Para tener, por ejemplo

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} A^* A \, dx = A^* A \int_{-\infty}^{\infty} dx = 1$$

la amplitud A deberá ser cero ya que $\int_{-\infty}^{\infty} dx$ tiene un valor infinito. La dificultad proviene de la aseveración irreal hecha por la función de onda acerca de que la partícula se puede encontrar con igual probabilidad en cualquier parte de un haz de longitud infinita. Lo cual nunca es cierto ya que los haces reales siempre tienen longitud finita. El haz de protones está limitado en un extremo por el ciclotrón y en el otro por una pared del laboratorio. No obstante que la incertidumbre Δx en la localización de un protón es mucho mayor que un radio nuclear r' no es mayor que la distancia L del ciclotrón a la pared. Esto es, si bien es cierto que $\Delta x \gg r'$ también lo es $\Delta x < L$. Lo cual sugiere que la normalización se puede obtener haciendo $\Psi = 0$ fuera del intervalo $-L/2 < x < +L/2$ o bien restringiendo x a este intervalo. En cualquier forma se obtiene una descripción más realista de la verdadera situación física y también es posible normalizar la función de onda con una amplitud A diferente de cero. Al procedimiento se le denomina *normalización en una caja*. Ignorando el hecho de que el valor de A que se obtiene depende de la longitud L de la caja, siempre resulta que los cálculos de una cantidad mensurable son independientes del valor utilizado para L . Además, se verá que por lo general no es necesario realizar la normalización en una caja debido a que las cantidades con interés físico se pueden expresar como relaciones en las cuales se cancela el valor de A .

La situación es completamente análoga a las que se encuentran comúnmente en la física clásica. Por ejemplo, al resolver un problema de electrostática se utiliza un alambre cargado de longitud infinita como aproximación de uno de longitud finita en el cual los "efectos de orilla" no son importantes. Esta idealización simplifica mucho la geometría del problema, pero implica la dificultad de que se requiere una cantidad de energía infinita para cargar a alambre infinitamente largo a menos que su densidad de carga sea cero. Sin embargo, usualmente es posible eliminar esta dificultad expresando las cantidades que interesan en términos de relaciones.

Es posible obtener un sentido mucho más realista del movimiento que el presentado en la figura 6-1 si se utiliza un número grande de funciones de onda de la forma de (6-9) como para generar un grupo de ondas viajeras. La figura 6-2 muestra la densidad de probabilidad $\Psi^*\Psi$ para un grupo particularmente simple, su movimiento es en la dirección en la que crece x , que es la dirección en la que crece el ancho del grupo. Para cualquier instante la localización del grupo se puede caracterizar por el valor de expectación \bar{x} calculado de la densidad de probabilidad. La velocidad constante del grupo $d\bar{x}/dt$, es igual a la velocidad constante de la partícula libre $v = p/m = \sqrt{2mE}/m = \sqrt{2E/m}$, de acuerdo con las conclusiones del capítulo 3. El desvanecimiento del grupo es una propiedad característica de las ondas que está íntimamente relacionada con el principio de incertidumbre tal como se estudió en ese capítulo. Por supuesto que el comportamiento del grupo de funciones de onda es más fácil de interpretar que el comportamiento de una función de onda senoidal, tal como (6-9), ya que la densidad de probabilidad correspondiente es más aproximada a la descripción del movimiento de una partícula con el cual estamos familiarizados por la mecánica clásica. Sin embargo, las matemáticas necesarias para describir al grupo y tratar su comportamiento analíticamente son mucho más complicadas. La razón es que un grupo involucra necesariamente una distribución de números de onda k y por lo tanto una distribución de energías $E = \hbar^2 k^2 / 2m$. Aún para componer un grupo simple como el mostrado en la figura, es necesario sumar de la manera descrita en el capítulo 3 un gran número de ondas senoidales con diferencias muy pequeñas en los números de onda o en las energías. Estas complicaciones matemáticas se ven contrapesadas por las ventajas de facilidad en la interpretación. Consecuentemente, rara vez se utilizan estos grupos para realizar cálculos prácticos en la mecánica cuántica y la mayoría de ellos se realizan con funciones de onda que contienen un solo número de onda y una sola energía.

Las consideraciones del movimiento del grupo de la figura 6-2 nos llevan a estudiar brevemente un caso relacionado que es de gran interés. Si en vez de tener un valor constante igual a cero la función potencial $V(x)$ cambia tan lentamente que su valor es casi constante sobre una distancia del orden de la longitud de onda de de Broglie de la partícula, la función de onda del grupo se propagará en una manera similar a la ilustrada en la figura pero ahora la velocidad del grupo también cambiará lentamente. Comenzando con la ecuación de Schrö-

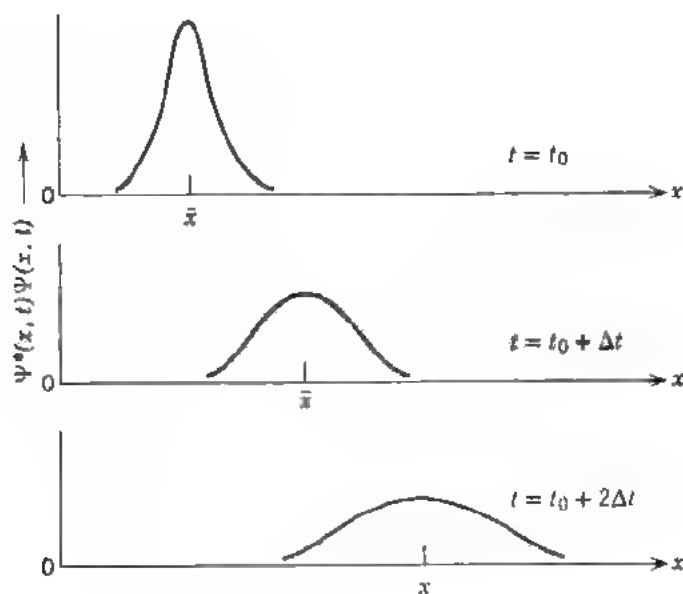


FIGURA 6-2

La densidad de probabilidad $\Psi^*\Psi$ para una función de onda viajera de una partícula libre. Cuando el tiempo aumenta el grupo se mueve en la dirección en la que crece x y también se desvanece.

dingier los cálculos conducen a una expresión que relaciona el cambio en la velocidad del grupo, $d\bar{x}/dt$, con el cambio en el potencial $V(x)$. La expresión es

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{d\bar{x}}{dt}\right) = \frac{d}{dx}\left(-\frac{V(x)}{m}\right)$$

o

$$\frac{d^2\bar{x}}{dt^2} = -\frac{\overline{dV(x)}}{m} = \frac{\overline{F(x)}}{m}$$

donde las barras denotan los valores de expectación y $F(x)$ es la fuerza que corresponde al potencial $V(x)$. Es una desgracia que los cálculos sean tan complicados como para reproducirlos aquí. Son muy significativos ya que muestran que la aceleración promedio de la partícula asociada con la función de onda del grupo que es igual a la fuerza promedio que actúa sobre la partícula dividida entre su masa. Esto es, la ecuación de Schrödinger conduce al resultado de que una partícula de un sistema microscópico obedece, en promedio, la ley de Newton del movimiento. Las fluctuaciones de su comportamiento promedio reflejan el principio de incertidumbre y son muy importantes en el límite microscópico. Pero estas fluctuaciones resultan despreciables en el límite macroscópico donde el principio de incertidumbre no trae consecuencias consigo y no es necesario el seguir hablando de promedios alrededor de la localización. Igualmente, en el límite macroscópico cualquier potencial realista cambia solamente una cantidad pequeña en una distancia tan corta como una longitud de onda de de Broglie. Por lo tanto, en este límite, tampoco es necesario hablar de promedios cuando se estudian los potenciales. Entonces, en el límite macroscópico se pueden ignorar las barras que representan los valores de expectación o promedios en las ecuaciones anteriores. Entonces se concluye que *las leyes de Newton del movimiento se pueden derivar de la ecuación de Schrödinger en el límite clásico de sistemas macroscópicos. La ley de Newton del movimiento es un caso especial de la ecuación de Schrödinger.*

6.3 El potencial escalón (energía menor que el alto del escalón)

En las secciones siguientes se estudiarán las soluciones a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para una partícula cuya energía potencial se puede representar por una función $V(x)$ que tiene valores distintos en cada uno de los diferentes intervalos del eje x . Los valores de estos potenciales cambian abruptamente al pasar de un intervalo al siguiente. Claro que este tipo de potenciales que cambian abruptamente (es decir, son funciones discontinuas de x) no existen en la naturaleza. Sin embargo, estos potenciales idealizados se usan frecuentemente en la mecánica cuántica para aproximar situaciones reales ya que, al ser constantes en cada intervalo, son fáciles de tratar matemáticamente. Los resultados que se obtendrán de estos potenciales nos servirán para ilustrar un número de fenómenos característicos de la mecánica cuántica.

Una analogía, que seguramente resultará familiar al estudiante se encuentra en el procedimiento utilizado en el estudio del electromagnetismo el cual involucra el tratamiento de muchos sistemas idealizados como el alambre infinito, el capacitor sin orillas etc. Estos sistemas se estudian porque son relativamente fáciles de tratar, porque son excelentes aproximaciones a los reales y porque los sistemas reales usualmente son complicados para tratarlos matemáticamente ya que tienen geometrías complicadas. Los potenciales idealizados que se tratan en este capítulo se usan en la misma forma y con la misma justificación.

El caso más simple es el *potencial escalón* que se ilustra en la figura 6-3. Si se escoge el origen del eje x en el escalón y a la constante arbitraria aditiva que siempre aparece en la definición del potencial de tal manera que la energía potencial de la partícula sea cero cuando ésta se encuentre a la izquierda del escalón; $V(x)$ se puede escribir

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & x > 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases} \quad (6-11)$$

donde V_0 es una constante. Se puede pensar en $V(x)$ como una representación aproximada de la función energía potencial para una partícula cargada que se mueve a lo largo del eje de un sistema de dos electrodos, separados por una brecha muy pequeña, y que se mantienen a voltajes diferentes. La mitad superior de la figura 6-4 ilustra este sistema y la mitad inferior ilustra la función energía potencial correspondiente. Conforme decrece la brecha, la función potencial se aproxima a la idealización que se ilustra en la figura 6-3. En el ejemplo 6-2 se verá que la energía potencial para un electrón que se mueve cerca de la superficie de un metal es muy parecida a un potencial escalón ya que crece muy rápidamente en la superficie desde un valor interior esencialmente constante hasta un valor exterior constante mucho mayor.

Supóngase que una partícula de masa m y energía total E se encuentra en la región $x < 0$, y que se mueve hacia el punto $x = 0$ en el cual el potencial escalón $V(x)$ cambia su valor en forma brusca. Según la mecánica clásica la partícula se moverá libremente en esta región hasta que alcance $x = 0$, donde estará sujeta a una fuerza impulsiva $F = -dV(x)/dx$ que actúa en la dirección en la que x decrece. El potencial idealizado (6-11) implica una fuerza impulsiva de magnitud infinita y que actúa solamente en el punto $x = 0$. Sin embargo, como esta fuerza actúa sobre la partícula solamente por un tiempo infinitesimal, la cantidad $\int F dt$ (la impulsión) que determina el cambio en su impulso, es finita. De hecho, el cambio en el impulso no se ve afectado por la idealización.

En la mecánica clásica, el movimiento que sigue a la acción de la fuerza en $x = 0$, depende de la relación entre E y V_0 . Lo cual también es cierto en la mecánica cuántica. En esta sección se trata el caso en el que $E < V_0$, es decir, cuando la energía total es menor que la altura del escalón

FIGURA 6-3

Un potencial escalón.

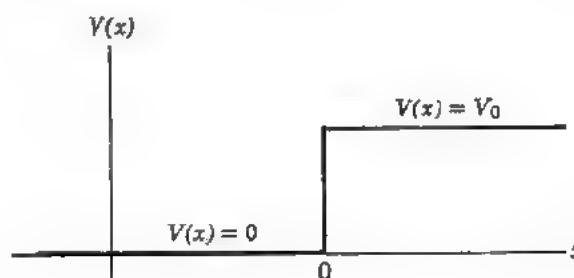
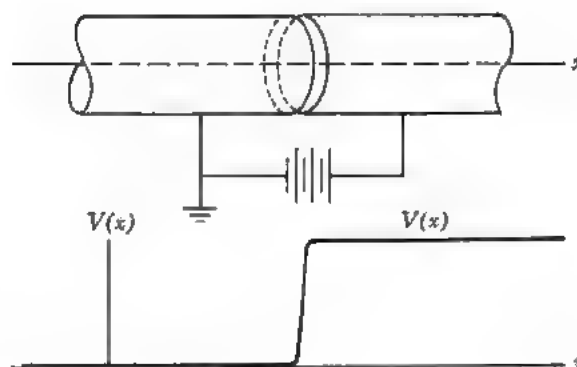


FIGURA 6-4

Ilustración de un sistema físico en el que la función energía-potencial se puede aproximar por un potencial escalón. Una partícula cargada se mueve a lo largo del eje de dos electrodos cilíndricos que se mantienen a voltajes diferentes. En el interior de cualquiera de los electrodos su energía potencial es constante, pero cambia muy rápidamente cuando se pasa de uno a otro.



potencial, tal y como se ilustra en la figura 6-5. (El caso en el que $E > V_0$ se tratará en la siguiente sección). Ya que la energía total E es una constante, la *mecánica clásica* predice que la partícula no puede entrar en la región $x > 0$. La razón es que en esta región

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x) < V(x)$$

o

$$\frac{p^2}{2m} < 0$$

Entonces la energía cinética $p^2/2m$ sería negativa en la región $x > 0$, lo que conduciría a un valor imaginario para el impulso lineal p en esta región. Lo cual no está permitido ni tiene sentido físico en la mecánica clásica, según la cual, la fuerza impulsiva cambiará el impulso de la partícula en tal forma, que ésta invierta su movimiento y viaje en la dirección en la que x decrece con el impulso en la dirección opuesta a su impulso inicial. La magnitud del impulso p será la misma antes y después de la inversión puesto que la energía total $E = p^2/2m$ es constante.

Según la *mecánica cuántica*, para determinar el movimiento de la partícula habrá de determinarse la función de onda que es solución a la ecuación de Schrödinger para el potencial escalón de la ecuación (6-11) con la energía total $E < V_0$. Puesto que este potencial es independiente del tiempo, el problema real por resolver es la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Del análisis cualitativo del capítulo anterior se sabe que existirá una solución aceptable para *cualquier* valor de $E \geq 0$, ya que el potencial no puede ligar a la partícula a un intervalo limitado del eje x .

Para el potencial escalón, el eje x se divide en dos regiones, en la región en la que $x < 0$ (a la izquierda del escalón), se tiene $V(x) = 0$, de manera que la eigenfunción que dará información sobre el comportamiento de la partícula es una solución a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \quad x < 0 \quad (6-12)$$

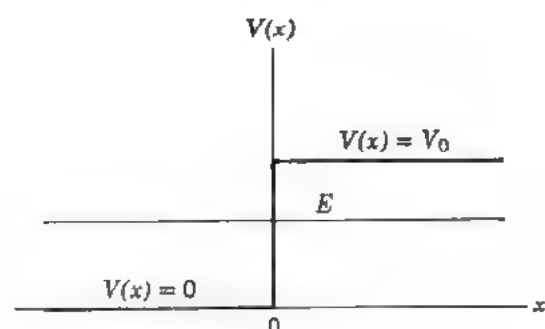
En la región en la que $x > 0$ (a la derecha del escalón), se tiene $V(x) = V_0$, y la eigenfunción es una solución a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo la cual es casi tan simple como la anterior

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V_0\psi(x) = E\psi(x) \quad x > 0 \quad (6-13)$$

Estas dos ecuaciones se resuelven por separado y, por lo tanto, se habrá de construir una eigenfunción válida para el intervalo completo de x uniendo las dos soluciones en $x = 0$, de tal

FIGURA 6-5

Relación entre las energías potencial y total para una partícula que incide sobre un potencial escalón con energía total menor que la altura del escalón



manera que satisfagan los requisitos mencionados en la sección 5-6, es decir, que la eigenfunción y su primera derivada sean finitas en todas partes, monovaluadas y continuas.

Considérese la ecuación diferencial (6-12) que es válida para la región en la cual $V(x)=0$. Ya que esta es precisamente la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para una partícula libre, se toma como su solución *general* la eigenfunción (6-8), que es una onda viajera que se escribe como

$$\psi(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad \text{donde } k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad x < 0 \quad (6-14)$$

Considérese enseguida la ecuación diferencial (6-13) que es válida para la región en la cual $V(x)=V_0$. De las consideraciones cualitativas de la sección 5-7 no es de esperarse que una función oscilatoria como la (6-14) sea solución, ya que en la región de interés la energía total E es menor que la energía potencial V_0 . De hecho, aquellas consideraciones afirmaban que la solución era una función que se aproxima "gradualmente al eje x ". La función más simple con esta propiedad es la exponencial *real* decreciente, que se puede escribir

$$\psi(x) = e^{-k_2x} \quad x > 0 \quad (6-15)$$

Veamos si esta es una solución y de serlo se determinará el valor requerido de k_2 ; para esto se substituirá en (6-13), que debe satisfacer supuestamente. Primero se evalúa

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = (-k_2)^2 e^{-k_2x} = k_2^2 \psi(x)$$

Y substituyendo, resulta

$$-\frac{\hbar^2}{2m} k_2^2 \psi(x) + V_0 \psi(x) = E \psi(x)$$

Que satisface la ecuación y por lo tanto verifica la solución, proporcionando:

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad E < V_0 \quad (6-16)$$

La solución que se ha verificado no es una solución *general* a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (6-13). La razón es que la ecuación contiene una segunda derivada, de modo que la solución general deberá contener dos constantes arbitrarias. Sin embargo, si se encuentra una solución a la ecuación para el mismo valor de E y resulta diferente de la solución encontrada anteriormente es posible hacer una combinación lineal arbitraria de estas soluciones *particulares*. La combinación lineal también será solución y puesto que contiene dos constantes arbitrarias será una solución *general*.

Es posible encontrar la forma de otra solución particular observando que k_2 interviene en la ecuación (6-16) como un cuadrado. Por lo tanto, el signo resulta intrascendente y la exponencial creciente

$$\psi(x) = e^{+k_2x} \quad \text{donde } k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad x > 0 \quad (6-17)$$

también será solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo que se ha tratado. Lo cual es igualmente fácil de verificar por substitución en la ecuación. En vez de esto, se verifica que la combinación lineal arbitraria de las dos soluciones particulares

$$\psi(x) = Ce^{k_2x} + De^{-k_2x} \quad \text{donde } k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad x > 0 \quad (6-18)$$

es una solución de (6-13), con C y D las dos constantes arbitrarias. Calculando

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = Ck_2^2 e^{k_2 x} + D(-k_2)^2 e^{-k_2 x} = k_2^2 \psi(x) = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \psi(x)$$

y substituyendo el resultado en la ecuación, obteniendo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)\psi(x) + V_0\psi(x) = E\psi(x)$$

Ya que obviamente esto se satisface, se verifica que (6-18) es una solución. Puesto que contiene dos constantes arbitrarias, es la solución *general* a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para la región del potencial escalón en la que $V(x) = V_0$, con $E < V_0$. Aunque la parte de la exponencial creciente no se usará en esta sección, sí se usará en las siguientes.

Las constantes arbitrarias A , B , C y D de (6-14) y (6-18) se deben escoger de modo que las eigenfunciones satisfagan los requisitos siguientes: ser finitas, monovaluadas y continuas; requisitos de $\psi(x)$ y $d\psi(x)/dx$. Primero considérese el comportamiento de $\psi(x)$ cuando $x \rightarrow +\infty$. En esta región del eje x la forma general de $\psi(x)$ está dada por (6-18). Mediante inspección es posible ver que $\psi(x)$ generalmente aumenta sin límite conforme $x \rightarrow +\infty$, debido a la presencia del primer término $Ce^{k_2 x}$. Para prevenir esto y mantenerla finita, se deberá tomar el coeficiente arbitrario C del primer término igual a cero.

$$C = 0 \quad (6-19)$$

Estas funciones satisfacen de manera automática la condición de ser monovaluadas. Para estudiar su continuidad considérese el punto $x = 0$. En este punto las dos formas de $\psi(x)$, dadas por (6-14) y (6-18), se deben unir de modo tal que $\psi(x)$ y $d\psi(x)/dx$ sean continuas. La continuidad de $\psi(x)$ se obtiene satisfaciendo la relación

$$D(e^{-k_2 x})_{x=0} = A(e^{ik_1 x})_{x=0} + B(e^{-ik_1 x})_{x=0}$$

que proviene de igualar las dos formas en $x = 0$; relación que conduce a

$$D = A + B \quad (6-20)$$

La continuidad de la derivada de las dos formas

$$\frac{d\psi(x)}{dx} = -k_2 D e^{-k_2 x} \quad x > 0$$

y

$$\frac{d\psi(x)}{dx} = ik_1 A e^{ik_1 x} - ik_1 B e^{-ik_1 x} \quad x < 0$$

se obtiene igualando estas derivadas en $x = 0$.

$$-k_2 D(e^{-k_2 x})_{x=0} = ik_1 A(e^{ik_1 x})_{x=0} - ik_1 B(e^{-ik_1 x})_{x=0}$$

que conduce a

$$\frac{ik_2}{k_1} D = A - B \quad (6-21)$$

Sumando (6-20) y (6-21) se tiene

$$A = \frac{D}{2} \left(1 + \frac{ik_2}{k_1} \right) \quad (6-22)$$

Y restándolas

$$B = \frac{D}{2} \left(1 - \frac{ik_2}{k_1} \right) \quad (6-23)$$

Con lo que se ha determinado A , B y C en términos de D y por lo tanto la eigenfunción para el potencial escalón y para la energía $E < V_0$, es

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{D}{2} (1 + ik_2/k_1) e^{ik_1 x} + \frac{D}{2} (1 - ik_2/k_1) e^{-ik_1 x} & x \leq 0 \\ D e^{-k_2 x} & x \geq 0 \end{cases} \quad (6-24)$$

La constante arbitraria que resta, D , determina la amplitud de la eigenfunción pero no interviene en ninguna de sus características más importantes. La presencia de esta constante refleja el hecho de que la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es lineal en $\psi(x)$, y por lo tanto están permitidas soluciones de cualquier amplitud. Posteriormente se verá que usualmente es posible obtener resultados útiles sin molestarse en efectuar el procedimiento de normalización que especificaría a D . La razón es que las cantidades mensurables que se obtendrán como predicciones de la teoría contienen a D tanto en el numerador como en el denominador de una relación, de modo que se cancela.

La función de onda correspondiente a la eigenfunción es

$$\Psi(x, t) = \begin{cases} A e^{ik_1 x} e^{-iEt/\hbar} + B e^{-ik_1 x} e^{-iEt/\hbar} = A e^{i(k_1 x - Et/\hbar)} + B e^{i(-k_1 x - Et/\hbar)} & x \leq 0 \\ D e^{-k_2 x} e^{-iEt/\hbar} & x \geq 0 \end{cases} \quad (6-25)$$

Considérese la región $x < 0$. Para esta región el primer término en la función de onda es una onda viajera que se propaga en la dirección en la que crece x y que describe una partícula que se mueve en la misma dirección. El segundo término en la función de onda para $x < 0$ es una onda que se propaga en la dirección en la que decrece x y describe a una partícula que se mueve en esta dirección. Esta información sumada a las predicciones clásicas descritas con anterioridad sugieren que se podría asociar el primer término con la incidencia de la partícula sobre el potencial escalón y al segundo con la reflexión de la partícula por éste. Utilizando esta asociación para calcular la probabilidad de que la partícula incidente sea reflejada y llamémosla *coeficiente de reflexión* R . Obviamente, R depende de la relación B/A que especifica la amplitud de la parte reflejada de la función de onda con relación a la amplitud de la parte incidente. Pero en mecánica cuántica las probabilidades dependen de las intensidades, tales como $B^* B$ y $A^* A$, y no de las amplitudes. Por lo tanto R se deberá evaluar a partir de la fórmula

$$R = \frac{B^* B}{A^* A} \quad (6-26)$$

Esto es, el coeficiente de reflexión es igual a la relación de la intensidad de la parte de la onda que describe a la partícula reflejada a la intensidad que describe a la partícula incidente. Se obtiene

$$R = \frac{B^* B}{A^* A} = \frac{(1 - ik_2/k_1)^* (1 - ik_2/k_1)}{(1 + ik_2/k_1)^* (1 + ik_2/k_1)}$$

O

$$R = \frac{(1 + ik_2/k_1)(1 - ik_2/k_1)}{(1 - ik_2/k_1)(1 + ik_2/k_1)} = 1 \quad E < V_0 \quad (6-27)$$

El hecho de que esta razón sea igual a uno significa que una partícula que incide sobre el potencial escalón, con energía total menor que la altura del escalón, tiene una probabilidad de ser reflejada igual a uno, es decir, siempre se refleja. Lo cual concuerda con las predicciones de la mecánica clásica.

Considérense ahora las eigenfunciones de (6-24). Utilizando la relación

$$e^{ik_1x} = \cos k_1x + i \operatorname{sen} k_1x \quad (6-28)$$

es fácil demostrar que la eigenfunción se puede expresar como

$$\psi(x) = \begin{cases} D \cos k_1x - D \frac{k_2}{k_1} \operatorname{sen} k_1x & x \leq 0 \\ D e^{-k_2x} & x \geq 0 \end{cases} \quad (6-29)$$

Si se genera la función de onda multiplicando $\psi(x)$ por $e^{-iEt/\hbar}$, es muy fácil ver que lo que se tiene es una onda estacionaria ya que la localización de los nodos no cambia con el tiempo. En este problema las ondas viajeras incidente y reflejada se combinan para formar una onda estacionaria para $x < 0$ ya que son de igual intensidad. En la figura 6-6 se muestra esto de manera esquemática.

En la parte superior de la figura 6-7 se muestra la función de onda mediante la gráfica de la eigenfunción (6-29) que es una función real de x si se toma a D real. Se puede pensar que la función de onda es una función oscilante en el tiempo según $e^{-iEt/\hbar}$ y con una amplitud cuya dependencia espacial está dada por $\psi(x)$. Aquí se encuentra un detalle que constituye un

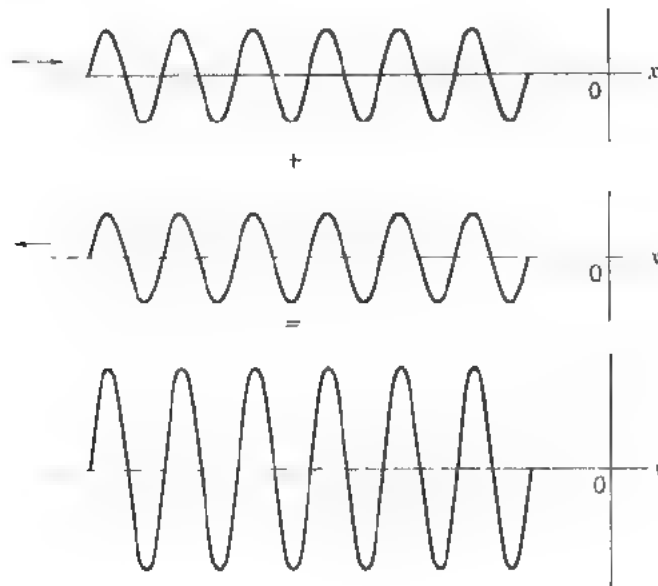
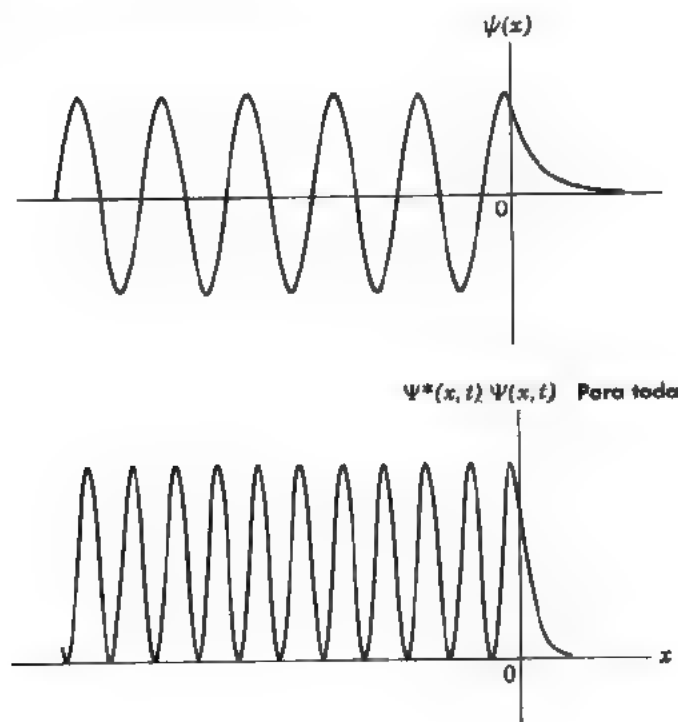


FIGURA 6-6

Ilustración esquemática de la combinación de una onda incidente y una reflejada de intensidades iguales para formar una onda estacionaria. La función de onda se ve reflejada en $x=0$ por un potencial escalón. Observe que los nodos de las ondas viajeras se mueven a derecha e izquierda pero los de la onda estacionaria están estacionarios.

**FIGURA 6-7**

Arriba: Eigenfunción $\psi(x)$ para una partícula que incide en $x=0$ sobre un potencial escalón con energía total menor que la altura del escalón. Observe la penetración de la eigenfunción en la región clásicamente excluida $x > 0$. *Abajo:* Densidad de probabilidad $\Psi^*\Psi = \psi^*\psi = \psi^2$ correspondiente a esta eigenfunción. Los espacios entre los picos de ψ^2 son dos veces menores que los que existen entre los picos de ψ .

contraste profundo con las predicciones clásicas. Si bien en la región $x > 0$ la densidad de probabilidad

$$\Psi^*\Psi = D^*e^{-k_2x}e^{+iEt/\hbar}De^{-k_2x}e^{-iEt/\hbar} = D^*De^{-2k_2x} \quad (6-30)$$

que se ilustra en la parte inferior de la figura 6-7, decrece rápidamente conforme crece x , existe una probabilidad finita de que la partícula se encuentre en la región $x > 0$. En la mecánica clásica sería absolutamente imposible encontrar la partícula en esta región ya que la energía total es menor que la energía potencial de modo que la energía cinética $p^2/2m$ es negativa y el impulso p es imaginario. Este fenómeno, llamado *penetración de la región clásicamente excluida*, es una de las predicciones más impresionantes de la mecánica cuántica.

Posteriormente se discutirán ciertos experimentos que confirman esta predicción pero aquí se harán algunas observaciones al respecto. Una es que la penetración *no* significa que la partícula quede almacenada en la región clásicamente excluida ya que, como se ha visto, la partícula incidente es, en definitiva, reflejada por el escalón.

Otro punto es que la penetración de la región excluida, la cual obedece (6-30), *no* está en conflicto con los experimentos de la mecánica clásica. De la misma ecuación se ve que la probabilidad de encontrar a la partícula con una coordenada $x > 0$ solamente es apreciable en una región que principia en $x = 0$ y se extiende en una *distancia de penetración* Δx que es igual a $1/k_2$. La razón es que e^{-2k_2x} se va muy rápidamente a cero cuando x es mucho más grande que $1/k_2$. Puesto que $k_2 = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$, se tiene

$$\Delta x = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

En el límite clásico el producto de m y $(V_0 - E)$ es tan grande, comparado con \hbar^2 que Δx es inconmensurablemente pequeña.

Ejemplo 6-1. Estimar la distancia de penetración Δx para una partícula de polvo muy pequeña, de radio $r = 10^{-6}$ m y densidad $\rho = 10^4$ kg/m³ que se mueve a la velocidad (muy pequeña) $v = 10^{-2}$ m/seg, si la partícula golpea en la región de la izquierda de un potencial escalón de altura igual al doble de la energía cinética de la partícula.

La masa de la partícula es

$$m = \frac{4}{3} \pi r^3 \rho \simeq 4 \times 10^{-18} \text{ m}^3 \times 10^4 \text{ kg/m}^3 = 4 \times 10^{-14} \text{ kg}$$

Su energía cinética antes de pegar sobre el escalón es

$$\frac{1}{2} m v^2 \simeq \frac{1}{2} \times 4 \times 10^{-14} \text{ kg} \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{seg}^2 = 2 \times 10^{-18} \text{ joule}$$

que también es el valor de $(V_0 - E)$. La distancia de penetración es

$$\begin{aligned} \Delta x &= \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}} \simeq \frac{10^{-34} \text{ joule-seg}}{\sqrt{2 \times 4 \times 10^{-14} \text{ kg} \times 2 \times 10^{-18} \text{ joule}}} \\ &\simeq 2 \times 10^{-19} \text{ m} \end{aligned}$$

Por supuesto que esto es menor que lo que es posible detectar en cualquier experimento en muchos órdenes de magnitud. Para las partículas con más masa y energías mayores como las utilizadas en la mecánica clásica, Δx es aún menor. ◀

Además, nos gustaría apuntar que el principio de incertidumbre demuestra que las propiedades ondulatorias exhibidas por un ente al penetrar a la región excluida clásicamente *no* están en conflicto con sus propiedades de partícula. Considérese un experimento capaz de demostrar que la partícula está localizada en alguna parte de la región $x > 0$. Puesto que la densidad de probabilidad para $x > 0$ solamente es apreciable en un intervalo de longitud Δx , el experimento tratará de localizar la partícula dentro de este intervalo; al hacerlo necesariamente se llega a una incertidumbre Δp en el impulso, la cual deberá ser al menos tan grande como

$$\Delta p \simeq \frac{\hbar}{\Delta x} \simeq \sqrt{2m(V_0 - E)}$$

Consecuentemente, la energía de la partícula es incierta por una cantidad

$$\Delta E \simeq \frac{(\Delta p)^2}{2m} \simeq V_0 - E$$

y ya no es posible decir que la energía total E de la partícula es definitivamente menor que la energía potencial V_0 . Esto hace desaparecer el conflicto mencionado.

La penetración de la región clásicamente excluida *puede* conducir a consecuencias mensurables. Esto se verá posteriormente para un potencial que primero se eleva a una altura $V_0 > E$ pero que permanece en este valor sólo por una distancia no mucho mayor que la distancia de penetración Δx para después descender. De hecho, el fenómeno tiene consecuencias prácticas importantes. Un ejemplo, al cual nos referiremos muy pronto, es el diodo túnel que se utiliza en la electrónica moderna.

Ejemplo 6-2. Dentro de un bloque de *Cu* se mueve un electrón de conducción con una energía total *E* bajo la influencia de un potencial que, con una buena aproximación, tiene un valor constante igual a cero dentro del bloque y cambia bruscamente al valor constante $V_0 > E$ fuera del bloque. El valor del potencial en el interior es esencialmente constante y se puede considerar como cero ya que un electrón de conducción en el interior del metal experimenta una fuerza de Coulomb neta sumamente pequeña, ya que la distribución de carga que le rodea es aproximadamente uniforme. El potencial aumenta muy rápidamente en la superficie del metal hasta alcanzar el valor exterior V_0 debido a que el electrón experimenta una fuerza intensa ejercida por la distribución de carga no uniforme presente en esta región. Esta fuerza tiende a regresar el electrón al metal y por lo tanto es la que causa que el electrón de conducción esté ligado este mismo. Puesto que el electrón está ligado, V_0 deberá ser mayor que su energía total *E*. El valor del potencial exterior es constante si el metal no tiene carga total, ya que fuera de éste el electrón no sentirá ninguna fuerza. La masa del electrón es $m = 9 \times 10^{-31}$ kg. Las medidas de la energía necesaria para quitar de manera permanente al electrón del bloque, es decir, las medidas de la función de trabajo, demuestran que $V_0 - E = 4$ eV. De estos datos se puede estimar la distancia Δx que el electrón puede penetrar en la región clásicamente excluida en el exterior del bloque.

En el sistema mks,

$$V_0 - E = 4 \text{ eV} \times \frac{1.6 \times 10^{-19} \text{ joule}}{1 \text{ eV}} \simeq 6 \times 10^{-19} \text{ joule}$$

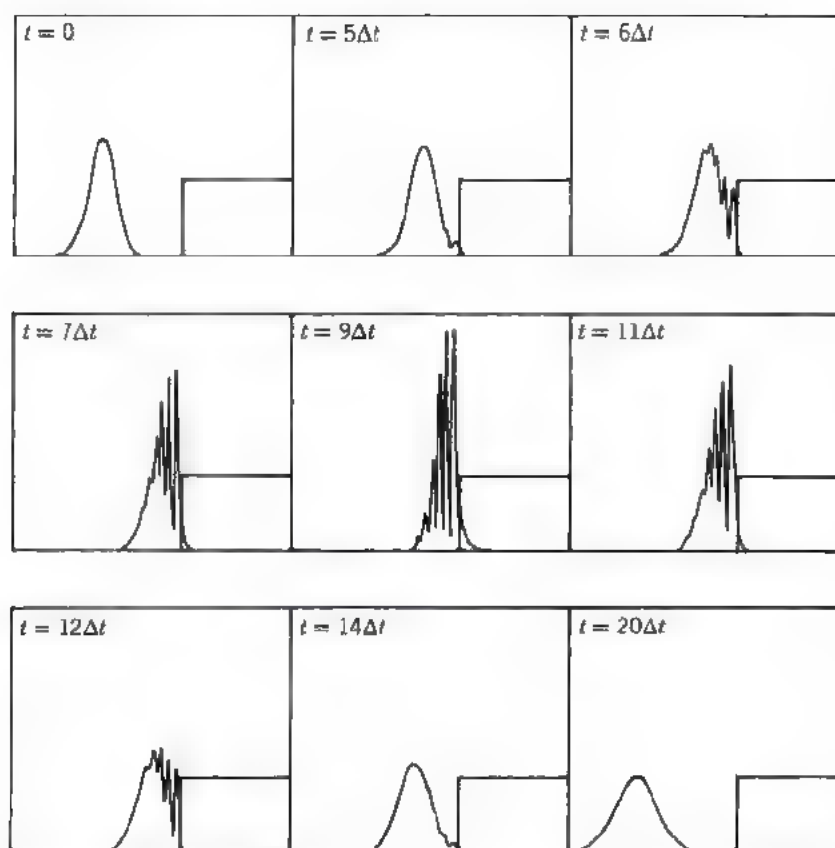
Así que

$$\begin{aligned} \Delta x &= \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}} \\ &\simeq \frac{10^{-34} \text{ joule-sec}}{\sqrt{2 \times 9 \times 10^{-31} \text{ kg} \times 6 \times 10^{-19} \text{ joule}}} \simeq 10^{-10} \text{ m} \end{aligned}$$

La distancia de penetración es del orden de las dimensiones atómicas. Por lo tanto el efecto puede tener consecuencias en los sistemas atómicos. Como se verá en breve, ciertamente el efecto es muy importante en circunstancias determinadas. ◀

Por último, se apuntará que la penetración de la región clásicamente excluida no es clásica en el sentido de que un ente que es clásico no se comporta como *tal*. Si no que se comporta como una *onda* clásica ya que, como se verá posteriormente, el fenómeno es bien conocido con las ondas luminosas desde el tiempo de Newton. La penetración por partículas materiales de la región clásicamente excluida es otra manifestación de la naturaleza ondulatoria de las partículas.

La figura 6-8 muestra la densidad de probabilidad para una función de onda en la forma de un grupo para el problema de una partícula que incide en la dirección en la que crece *x* sobre un potencial escalón con un valor promedio de la energía total menor que la altura del escalón. La función de onda se puede obtener sumando un número muy grande de funciones de onda de la forma (6-25) sobre la energía total *E*. También se puede obtener por una solución numérica directa de la ecuación de Schrödinger. Como se puede suponer de las complicaciones indicadas en la figura, cualesquiera de estos procedimientos involucran una gran cantidad de trabajo con computadoras de alta velocidad. Los resultados de estos cálculos ciertamente contienen un sentido realista del movimiento de la partícula, pero obsérvese que estos resultados muestran que la partícula asociada con la función de onda reflejada por el escalón tiene probabilidad uno y existe algo de penetración de la región clásicamente excluida. El hecho que se puede aprender de estos resultados básicos provenientes de cálculos simp. es que involucran solamente a la función de onda (6-25) que contiene un solo valor de *E* es que por lo general en la mecánica cuántica no es necesario utilizar funciones de onda en la forma de grupos. Por supuesto que se deberá intentar el aprender la manera de interpretar las funciones de onda simples.

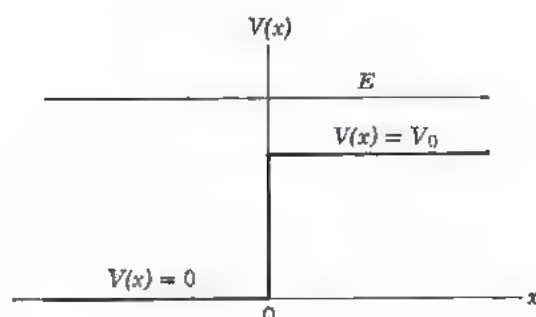
**FIGURA 6-8**

Un potencial escalón y la densidad de probabilidad $\Psi^*\Psi$ para un grupo de funciones de onda que describen a una partícula que incide sobre el escalón con energía total menor que la altura de éste. En cuanto al tiempo, el grupo se mueve hacia el escalón, penetra ligeramente en la región clásicamente excluida y a continuación se ve completamente reflejado por el escalón. Las complicaciones del tratamiento matemático que se presentan al tratar un grupo están indicadas por las complicaciones de su estructura durante la reflexión.

6.4 El potencial escalón (energía mayor que la altura del escalón)

En esta sección se considerará el movimiento de una partícula bajo la influencia de un escalón de potencial (6-11) cuando su energía total E es mayor que la altura V_0 del escalón. Esto es, se tomará $E > V_0$ tal como se ilustra en la figura 6-9.

En la *mecánica clásica* una partícula de energía total E que viaja en la región $x < 0$ en la dirección en la que crece x , sufrirá una fuerza impulsiva retardadora $F = -dV(x)/dx$ en el

**FIGURA 6-9**

Relación entre las energías potencial y total para una partícula que incide sobre un potencial escalón con energía total mayor que la altura del escalón.

unto $x = 0$. Pero el impulso sólo frenará la partícula y ésta entrará a la región $x > 0$ continuando su movimiento en la dirección en la que crece x . Su energía total E permanece constante; su impulso en la región $x < 0$ es p_1 , donde $p_1^2/2m = E$; su impulso en la región $x > 0$ es p_2 donde $p_2^2/2m = E - V_0$.

Se verá que las predicciones de la *mecánica cuántica* no son tan simples. Si E no es mucho mayor que V_0 la teoría predice que la partícula tiene una posibilidad apreciable de verse reflejada por el escalón hacia la región $x < 0$, aun cuando tenga la energía suficiente para pasar sobre el escalón hacia la región $x > 0$.

Un ejemplo de esto se encuentra en el caso de un electrón en el cátodo de una celda fotoeléctrica, donde recibe energía mediante la absorción de un fotón y trata de escapar de la superficie del cátodo metálico. Si su energía no es mucho mayor que la altura del escalón en el potencial que éste siente en la superficie del metal, se verá reflejado hacia atrás y no logrará escapar. Esto conduce a una reducción significativa en la eficiencia de las fotoceldas para luz de frecuencia no muy alejadas de la frecuencia de corte.

Un ejemplo más importante de la reflexión que ocurre cuando una partícula intenta pasar sobre un potencial escalón se encuentra en el movimiento de un neutrón en un núcleo. En buena aproximación el potencial que actúa sobre el neutrón en las cercanías de la superficie nuclear es un potencial escalón. El potencial crece muy rápidamente en la superficie nuclear ya que el núcleo trata de enlazar al neutrón. Si en una forma o en otra el neutrón recibe energía y trata de escapar del núcleo, probablemente sea reflejado hacia éste si su energía sólo es un poco mayor que la altura del escalón. Esto tiene el efecto de inhibir la emisión de neutrones con la energía más baja y por lo tanto aumentar de manera considerable la estabilidad de los núcleos en los estados excitados más bajos. El efecto es una manifestación de las propiedades ondulatorias de los neutrones que es muy importante en los procesos que tienen lugar en las reacciones nucleares, tal y como se verá hacia el final de este libro.

En la mecánica cuántica, el movimiento de la partícula bajo la influencia del potencial escalón está descrita por la función de onda

$$\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$$

donde la eigenfunción $\psi(x)$ satisface la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el potencial en cuestión. Esta ecuación tiene diferentes formas en las regiones izquierda y derecha del potencial escalón, a saber

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \quad x < 0 \quad (6-31)$$

y

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = (E - V_0)\psi(x) \quad x > 0 \quad (6-32)$$

La eigenfunción $\psi(x)$ también satisface las condiciones de ser finita, monovaluada y continua tanto ella como su primera derivada, particularmente en el punto de unión $x = 0$.

La ecuación (6-31) describe el movimiento de una partícula libre de impulso p_1 . Su solución general es

$$\psi(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad x < 0 \quad (6-33)$$

donde

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{p_1}{\hbar}$$

La ecuación (6-32) describe el movimiento de una partícula libre de impulso p_2 . Su solución general es

$$\psi(x) = C e^{ik_2 x} + D e^{-ik_2 x} \quad x > 0 \quad (6-34)$$

donde

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} = \frac{p_2}{\hbar} \quad E > V_0$$

La función de onda especificada por estas dos formas consisten de ondas estacionarias de longitud de onda de de Broglie $\lambda_1 = h/p_1 = 2\pi/k_1$ en la región $x < 0$ y de la longitud de onda de de Broglie más larga $\lambda_2 = h/p_2 = 2\pi/k_2$ en la región $x > 0$. Obsérvese que las funciones con las que aquí se ha tratado, satisfacen ya los requisitos de ser finitas y monovaluadas pero se deberá considerar explícitamente su continuidad y esto se hará en breve.

Una partícula inicialmente en la región $x < 0$ y moviéndose hacia $x = 0$ debería, en la mecánica clásica, tener una probabilidad igual a uno de pasar por el punto $x = 0$ y penetrar en la región $x > 0$, lo cual no es cierto en la mecánica cuántica. Debido a las propiedades ondulatorias de la partícula existe cierta probabilidad de que la partícula sea reflejada en el punto $x = 0$ donde existe un cambio discontinuo en la longitud de onda de de Broglie. Por lo tanto será necesario tomar ambos términos en la solución general de (6-33) para describir las ondas viajeras incidente y reflejada en la región $x < 0$. Sin embargo, no es necesario tomar el segundo término de la solución general de (6-34) ya que este término describe una onda que viaja en la dirección en la que decrece x en la región $x > 0$. Puesto que la partícula está incidiendo en la dirección en la que crece x , sólo podría provenir de una reflexión en algún punto con una coordenada x positiva mayor (más allá de la discontinuidad en $x = 0$). Como no hay nada fuera de aquí que cause una reflexión, se sabe que solamente existe una onda viajera transmitida en la región $x > 0$ y por lo tanto la constante se hace

$$D = 0 \quad (6-35)$$

en forma arbitraria.

Las constantes arbitrarias A , B y C deberán escogerse para que $\psi(x)$ y $d\psi(x)/dx$ sean continuas en $x = 0$. El primer requisito, que los valores $\psi(x)$ expresados por (6-33) y (6-34) sean los mismos en $x = 0$, se satisfacen si

$$A(e^{ik_1 x})_{x=0} + B(e^{-ik_1 x})_{x=0} = C(e^{ik_2 x})_{x=0}$$

o

$$A + B = C \quad (6-36)$$

El segundo requisito, que los valores de las derivadas de las dos expresiones para $\psi(x)$ sean los mismos en $x = 0$, se satisfacen si

$$ik_1 A(e^{ik_1 x})_{x=0} - ik_1 B(e^{-ik_1 x})_{x=0} = ik_2 C(e^{ik_2 x})_{x=0}$$

o

$$k_1(A - B) = k_2 C \quad (6-37)$$

De las dos últimas ecuaciones numeradas se encuentra

$$B = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A \quad \text{y} \quad C = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} A \quad (6-38)$$

Por lo tanto, la eigenfunción es

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ik_1x} + A \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} e^{-ik_1x} & x \leq 0 \\ A \frac{2k_1}{k_1 + k_2} e^{ik_2x} & x \geq 0 \end{cases} \quad (6-39)$$

Como antes, no será necesario evaluar la constante arbitraria A que determina la amplitud de la eigenfunción.

Es claro que una eigenfunción que satisfaga las dos ecuaciones de continuidad no podía haberse encontrado si desde el inicio se hace igual a cero el coeficiente B de la onda reflejada. Entonces solamente se tendrían dos constantes arbitrarias para satisfacer las dos condiciones de continuidad y no se tendría nada para efectuar la función, demandada por la linealidad de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo de una constante arbitraria que determina la amplitud de la eigenfunción.

Por la analogía con la interpretación de la eigenfunción de (6-24) se reconoce que el primer término en la expresión de (6-39) que es válido para $x < 0$ (a la izquierda de la discontinuidad) representa a la onda viajera incidente; el segundo término en la expresión válida para $x < 0$ representa la onda viajera reflejada y la expresión válida para $x > 0$ (a la derecha de la discontinuidad) representa la onda viajera transmitida.

La figura 6-10 ilustra la densidad de probabilidad $\Psi^*(x,t)\Psi(x,t) = \psi^*(x)\psi(x)$ para la función de onda $\Psi(x,t)$ que corresponde a la eigenfunción $\psi(x)$ de (6-39) (en el caso representativo $k_1 = 2k_2$). No se han representado ni la eigenfunción ni la función de onda ya que ambas son complejas. En la región $x > 0$ la función de onda es una onda viajera pura (en este caso de amplitud $4A/3$) que viaja hacia la derecha, y por lo tanto la densidad de probabilidad es constante como se muestra en la parte inferior de la figura (6-1). En la región $x < 0$ la función de onda es una combinación de la onda viajera incidente (de amplitud A) que se mueve hacia la derecha y una onda viajera reflejada (de amplitud $A/3$) que se mueve hacia la izquierda. Como la amplitud de la onda reflejada es necesariamente menor que la de la onda incidente, no es posible que ésta se combine para dar una onda estacionaria pura. Por el contrario, en esta región su suma $\Psi(x,t)$ es algo entre una onda estacionaria y una onda viajera; lo cual se ve en el comportamiento de $\Psi^*(x,t)\Psi(x,t)$ para $x < 0$ que luce como algo entre la densidad de probabilidad de la onda estacionaria de la figura 6-7 y la densidad de probabilidad de la onda viajera pura de la figura 6-1 que oscila pero tiene valores mínimos mayores que cero.

La relación de la intensidad de la onda reflejada a la intensidad de la onda incidente proporciona la probabilidad de que la partícula sea reflejada por el escalón de potencial hacia la región $x < 0$. Esta probabilidad es el *coeficiente de reflexión* R . Esto es

$$R = \frac{B^*B}{A^*A} = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^* \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right) = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 \quad E > V_0 \quad (6-40)$$

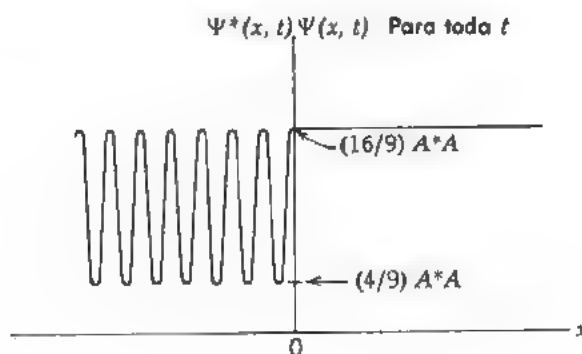


FIGURA 6-10

Densidad de probabilidad $\Psi^*\Psi$ para la eigenfunción de (6-39), cuando $k_1 = 2k_2$.

De estos resultados se ve que $R < 1$ cuando $E > V_0$, es decir, cuando la energía total de la partícula es mayor que la altura del potencial escalón. Esto está en contraste con el valor $R = 1$ cuando $E < V_0$, que se obtuvo del resultado de la sección (6-3). Por supuesto que lo sorprendente de este resultado no es que $R < 1$, sino que $R > 0$. Ya que una partícula clásica no debería ser reflejada si cuenta con energía suficiente como para pasar la discontinuidad del potencial. Por otra parte, y como se verá en breve, una onda clásica debería ser reflejada en una discontinuidad correspondiente.

Igualmente interesante resulta el *coeficiente de transmisión* T que especifica la probabilidad de que la partícula sea transmitida a través del potencial escalón desde la región $x < 0$ a la región $x > 0$. La evaluación de T es ligeramente más complicada que la evaluación de R ya que la velocidad de la partícula es distinta en cada región. De acuerdo con la norma aceptada, los coeficientes de transmisión y reflexión están definidos realmente en términos de las relaciones de los flujos de probabilidad. Un *flujo de probabilidad* es la probabilidad por segundo de encontrar una partícula cruzando algún punto de referencia en una dirección particular. El flujo de probabilidad incidente es la probabilidad por segundo de encontrar a una partícula cruzando un punto en $x < 0$ en la dirección en la que crece x ; el flujo de probabilidad reflejado es la probabilidad por segundo de encontrar a una partícula cruzando un punto en $x < 0$ en la dirección en la que x decrece; y el flujo de probabilidad transmitido es la probabilidad por segundo de encontrar a una partícula cruzando un punto en $x > 0$ en la dirección en la que x crece. Puesto que la probabilidad por segundo de que una partícula cruce un punto dado es proporcional a la distancia que viaja por segundo, el flujo de probabilidad es proporcional, no sólo a la intensidad de la onda apropiada sino también a la velocidad de la partícula. Entonces, de acuerdo con la definición estricta, el coeficiente de reflexión R es

$$R = \frac{v_1 B^* B}{v_1 A^* A} = \frac{B^* B}{A^* A} \quad (6-41)$$

donde v_1 es la velocidad de la partícula en la región $x < 0$. Ya que las velocidades se cancelan, lo que queda es idéntico a la fórmula que previamente se utilizó para R . Para T las velocidades *no* se cancelan y se tiene

$$T = \frac{v_2 C^* C}{v_1 A^* A} = \frac{v_2}{v_1} \left(\frac{2k_1}{k_1 + k_2} \right)^2$$

donde v_2 es la velocidad de la partícula en la región $x > 0$. Ahora

$$v_1 = \frac{p_1}{m} = \frac{\hbar k_1}{m} \quad \text{y} \quad v_2 = \frac{p_2}{m} = \frac{\hbar k_2}{m}$$

Así que la expresión anterior resulta

$$T = \frac{k_2}{k_1} \frac{(2k_1)^2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} \quad E > V_0 \quad (6-42)$$

Es fácil demostrar mediante la evaluación de R y T de (6-40) y (6-42) que

$$R + T = 1 \quad (6-43)$$

Esta útil relación es la motivación para definir los coeficientes de reflexión y de transmisión en términos de los flujos de probabilidad.

El flujo de probabilidad que incide sobre el potencial escalón se parte en un flujo transmitido y un flujo reflejado pero (6-43) afirma que su suma es igual al flujo incidente; es decir, la

probabilidad de que la partícula no desaparece ni se parte. En cualquier intento particular la partícula seguirá uno u otro camino. Para un gran número de intentos, la probabilidad promedio de seguir en la dirección en la que crece x está medida por T .
promedio de seguir en la dirección en que crece x está medida por T .

Obsérvese que si en (6-40) y (6-42) se intercambian los valores de k_1 y k_2 ni R ni T cambian su valor. Una breve consideración convencerá al estudiante de que esto significa que si la partícula incidiera sobre el potencial escalón en la dirección de decremento de x proveniente de la región $x > 0$ se obtendrían los mismos valores para R y para T . La función de onda que describe al movimiento de la partícula, y consecuentemente el flujo de probabilidad, es parcialmente reflejado, simplemente porque existe un cambio discontinuo en $V(x)$ y no porque $V(x)$ se haga más grande en la dirección en la que incide la partícula. El comportamiento de R y T al intercambiar k_1 y k_2 contiene una propiedad característica de todas las ondas y que en la óptica se le denomina en ocasiones propiedad de *reciprocidad*. Cuando la luz pasa perpendicularmente a través de una interfase entre medios con índices de refracción diferentes, una fracción de la luz es reflejada debido al cambio brusco en su longitud de onda y la misma fracción es reflejada independientemente de si ésta incide por un lado de la interfase o por el otro. Sucede exactamente lo mismo cuando una partícula microscópica experimenta un cambio brusco en su longitud de onda de de Broglie. De hecho las ecuaciones que gobiernan a los dos fenómenos son idénticas en forma. Una vez más se ve que una partícula microscópica se mueve de una manera ondulatoria.

En la figura 6-11 se grafican los coeficientes de reflexión y de transmisión como función de la relación E/V_0 . Evaluando k_1 y k_2 en (6-40) y (6-42) se encuentra que estas expresiones para los coeficientes de reflexión y de transmisión se pueden escribir en términos de la relación como

$$R = 1 - T = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - V_0/E}}{1 + \sqrt{1 - V_0/E}} \right)^2 \quad \frac{E}{V_0} > 1 \quad (6-44)$$

La figura también representa los resultados

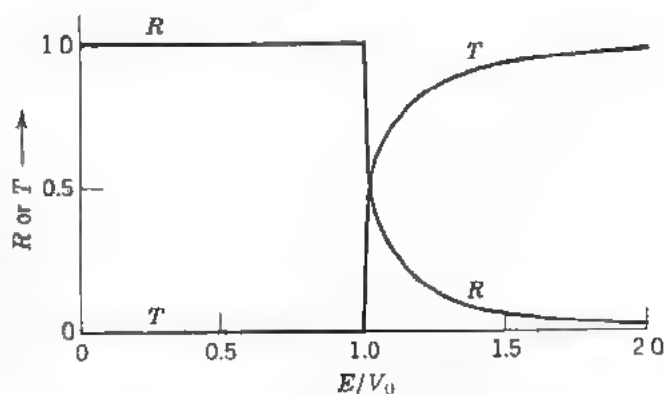
$$R = 1 - T = 1 \quad \frac{E}{V_0} < 1$$

que se obtienen en (6-27) de la sección anterior para un potencial escalón cuando $E/V_0 < 1$.

Veamos un ejemplo, para $E/V_0 = 1.33$ el coeficiente de transmisión tiene el valor $T = 0.88$. Esta relación E/V_0 corresponde al caso $k_2 = k_1/2$ cuyo patrón de densidad de probabilidad está ilustrado en la figura 6-10 de la que se puede observar que la probabilidad de encontrar a la partícula en una longitud dada del eje x , lo suficientemente larga como para promediar la densidad de probabilidad sobre las fluctuaciones mecánico-cuánticas, es aproximadamente el doble a la derecha del potencial escalón respecto de la izquierda. Desde un punto de vista clásico, que es apropiado para estudiar un promedio sobre las fluctuaciones mecánico-cuánticas, se puede decir que las razones para esto son: (a) la probabilidad de que la partícula pase al escalón y

FIGURA 6-11

Coeficientes de reflexión y transmisión R y T para una partícula que incide sobre un potencial escalón. La abscisa E/V_0 es la relación de la energía total de la partícula al incremento en su energía potencial, en el escalón. El caso $k_1 = 2k_2$, que se ilustró en la figura 6-10 corresponde a $E/V_0 = 1.33$.



penetre en la región de la derecha es casi igual a uno y (b) la velocidad de la partícula se parte por mitad cuando esta entra en la región a la derecha del escalón ya que $k = p/\hbar = mv/\hbar$ y $k_2 = k_1/2$, de manera que en esta región se utiliza dos veces más tiempo para cualquier longitud dada del eje.

De la figura 6-11 se ve que la energía de la partícula deberá ser apreciablemente mayor que la altura del potencial escalón para que la probabilidad de reflexión resulte insignificante. Sin embargo, el caso en el que E se hace muy grande no es necesariamente el caso del límite clásico para el cual se sabe que no hay reflexión. El punto es que (6-44) afirma que R sólo depende de la relación E/V_0 , de modo que se mantendría el mismo valor si V_0 aumenta al ritmo que lo hace E . Esto parece paradójico hasta que se comprende que, en el límite de energías grandes, la suposición básica de que el cambio en el valor del potencial escalón $V(x)$ es perfectamente definido, no puede continuar siendo una aproximación a una situación física real.

Si la función potencial sólo cambia en forma muy gradual con x , entonces la longitud de onda de de Broglie cambiará en forma muy gradual. En este caso, la reflexión será despreciable ya que el cambio en la longitud de onda es gradual y la reflexión proviene de un cambio brusco en la longitud de onda. Específicamente, si el cambio fraccional en $V(x)$ es muy pequeño cuando x cambia por una longitud de onda de de Broglie, entonces el coeficiente de reflexión será muy pequeño. Esto da lugar al límite clásico ya que en éste la longitud de onda de de Broglie es tan pequeña que cualquier potencial $V(x)$ físicamente realista sólo cambia por una fracción despreciable en una longitud de onda.

Para partículas en sistemas atómicos o nucleares la longitud de onda de de Broglie puede ser lar ya comparada con la distancia en la cual el potencial que experimentan las partículas cambia de valor de manera significativa. Entonces, el potencial escalón es una muy buena aproximación. Para estas partículas microscópicas la probabilidad de reflexión puede ser grande.

Ejemplo 6-3 Cuando un neutrón entra a un núcleo experimenta una energía potencial que decae muy rápidamente en la superficie del núcleo desde un valor constante externo $V = 0$ a un valor constante interno de aproximadamente $V = -50 \text{ MeV}$. El decremento en el potencial es lo que hace posible el que un neutrón esté ligado al núcleo. Considérese un neutrón que incide sobre un núcleo con una energía cinética externa $K = 5 \text{ MeV}$, que es típica para un neutrón emitido mediante una fisión nuclear. Estimar la probabilidad de que el neutrón sea reflejado en la superficie nuclear, o bien de que penetre y tenga oportunidad de inducir otra fisión nuclear.

Para hacer una estimación se deberá tomar el potencial neutrón-núcleo por un potencial unidimensional como el que se ilustra en la figura 6-12. Debido a la propiedad de reciprocidad del coeficiente de reflexión que se puede evaluar mediante (6-44), utilizando $V_0 = 50 \text{ MeV}$ y $E = 55 \text{ MeV}$ por razones que se pueden ver observando la figura. Se tiene

$$R = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - 50/55}}{1 + \sqrt{1 - 50/55}} \right)^2 \approx 0.29$$

Esta estimación da una impresión correcta de la gran importancia del fenómeno de la reflexión cuando chocan neutrones de baja energía con los núcleos. Pero el valor numérico que se ha obtenido para el coeficiente de reflexión no es muy preciso ya que el potencial real, neutrón-núcleo, no cae tan rápidamente en la superficie del núcleo (en comparación con la longitud de onda de de Broglie) como un potencial escalón. ◀

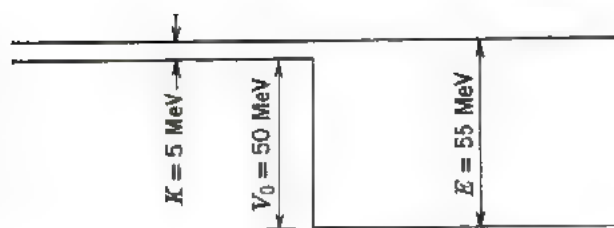
6.5 La barrera de potencial

En esta sección se considerará la *barrera de potencial* mostrada en la figura 6-13. El potencial se puede escribir como sigue

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & 0 < x < a \\ 0 & x < 0 \text{ o } x > a \end{cases} \quad (6-45)$$

FIGURA 6-12

Un neutrón de energía cinética externa K incide sobre un potencial escalón decreciente de profundidad V_0 , el cual se aproxima al potencial que siente al entrar al núcleo. Su energía total medida desde el fondo del potencial escalón es E .



Según la *mecánica clásica* una partícula de energía total E en la región $x < 0$ que incide sobre una barrera en la dirección en la que crece x tendrá una probabilidad de ser reflejada igual a uno, si $E < V_0$; y una probabilidad uno de ser transmitida a la región $x > a$ si $E > V_0$.

Ninguna de estas afirmaciones describe de manera adecuada los resultados de la *mecánica cuántica*. Si E es mucho mayor que V_0 , la teoría predice que habrá algo de reflexión excepto para ciertos valores de E . Si E es mucho menor que V_0 la mecánica cuántica predice que existe cierta probabilidad de que la partícula sea transmitida a través de la barrera a la región $x > a$.

En "el tunelamiento" a través de una barrera cuya altura excede su energía total, una partícula se comporta como una onda. Pero en la región lejana a la barrera se puede detectar como una partícula localizada sin introducir una incertidumbre significativa en el conocimiento de su energía. Entonces, se *puede* observar la penetración por una partícula de una región clásicamente excluida de ancho limitado. "observar" en el sentido de que es posible observar a la partícula como tal con energía total menor que la energía potencial en la región excluida, tanto antes como después de que penetra en la región. En esta sección se discutirán algunas consecuencias de este efecto fascinante, así como algunas consecuencias de la reflexión de las partículas que intentan pasar sobre la barrera. La siguiente sección está dedicada por completo a ejemplos de tunelamiento a través de barreras y se considerarán tres de importancia particular: (1) la emisión de partículas α por núcleos radiactivos a través de la barrera de potencial que experimentan en la vecindad de éstos, (2) la inversión de la molécula de amonio que proporciona un patrón de frecuencia para los relojes atómicos y (3) el diodo túnel que se utiliza como unidad de conmutación en los circuitos electrónicos rápidos.

De los argumentos cualitativos del último capítulo se sabe que para la barrera de potencial de (6-45) deberán existir soluciones aceptables a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para *todos* los valores de la energía total $E \geq 0$. También se sabe que la ecuación se parte en tres ecuaciones separadas para las tres regiones: $x < 0$ (a la izquierda de la barrera), $0 < x < a$ (en el interior de la barrera y $x > a$ (a la derecha de la barrera). En las regiones a la izquierda y a la derecha de la barrera las ecuaciones son las de una partícula libre de energía total E . Sus soluciones generales son

$$\begin{aligned} \psi(x) &= Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} & x < 0 \\ \psi(x) &= Ce^{ik_1x} + De^{-ik_1x} & x > a \end{aligned} \quad (6-46)$$

donde

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

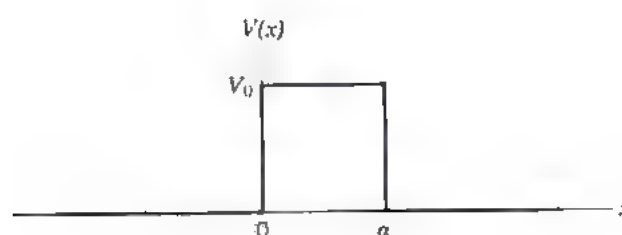


FIGURA 6-13

Barrera de potencial.

En la región interior de la barrera, la forma de la ecuación y su solución general depende de si $E < V_0$ o $E > V_0$. Ambos casos se han tratado en las secciones anteriores. En el primero, $E < V_0$, la solución general es

$$\psi(x) = Fe^{k_{II}x} + Ge^{-k_{II}x} \quad 0 < x < a \quad (6-47)$$

donde

$$k_{II} = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad E < V_0$$

En el segundo caso, $E > V_0$, es

$$\psi(x) = Fe^{ik_{III}x} + Ge^{-ik_{III}x} \quad 0 < x < a \quad (6-48)$$

donde

$$k_{III} = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} \quad E > V_0$$

Obsérvese que (6-47) contiene exponenciales *reales* mientras que en (6-46) y (6-48) son exponenciales *complejas*.

Puesto que se está considerando el caso de una partícula que incide desde la izquierda sobre la barrera, en la región de la derecha sólo puede haber una onda transmitida ya que no existe nada en esta región para que se produzca la reflexión. Entonces se puede poner

$$D = 0$$

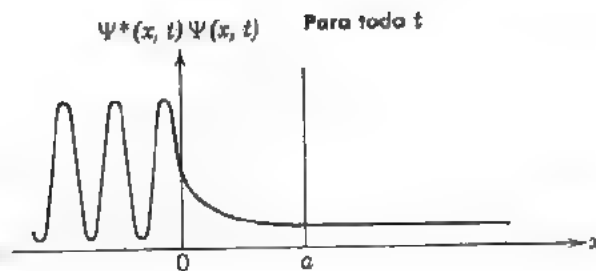
Sin embargo, en esta situación no se puede poner $G = 0$ en (6-47) ya que el valor de x está limitado en la región de la barrera, $0 < x < a$, así que $\psi(x)$ para $E < V_0$ no se puede hacer infinitamente grande aun estando presente la exponencial creciente. Tampoco se puede poner $G = 0$ en (6-48) ya que $\psi(x)$ para $E > V_0$ tendrá una componente en la región de la barrera reflejada que proviene de la discontinuidad del potencial en $x = a$.

Considérese primero el caso en el cual la energía de la partícula es menor que la altura de la barrera, es decir, el caso:

$$E < V_0$$

Al acoplar $\psi(x)$ y $d\psi(x)/dx$ en los puntos $x = 0$ y $x = a$, se obtienen cuatro ecuaciones en las constantes arbitrarias A, B, C, F , y G . Estas ecuaciones se pueden utilizar para evaluar B, C, F , y G en términos de A . El valor de A determina la amplitud de la eigenfunción y se puede dejar arbitraria. La forma de la densidad de probabilidad correspondiente a la eigenfunción se indica en la figura 6-14 para una situación típica. En la región $x > a$ la función de onda es una onda viajera pura y por lo tanto la densidad de probabilidad es constante, de la misma manera que para $x > 0$ en la figura 6-10. En la región $x < 0$ la función de onda es fundamentalmente una onda estacionaria pero tiene una componente pequeña de onda viajera debido a que la onda viajera reflejada tiene una amplitud menor que la de la onda incidente. Por lo tanto, la densidad de probabilidad en esta región oscila pero tiene valores mínimos algo mayores que cero, como para $x < 0$ en la figura 6-10. En la región $0 < x < a$ la función de onda tiene componentes de los dos tipos pero principalmente es una onda estacionaria de amplitud exponencialmente decreciente y su comportamiento se puede ver en el comportamiento de la densidad de probabilidad en la región.

El resultado más interesante de los cálculos es la razón T , del flujo de probabilidad transmitido a través de la barrera a la región $x > a$, al flujo de probabilidad incidente sobre la barrera.

**FIGURA 6-14**

Función densidad de probabilidad $\Psi^*\Psi$ para una situación típica de penetración de barrera.

Este coeficiente de transmisión es

$$T = \frac{v_1 C^* C}{v_1 A^* A} = \left[1 + \frac{(e^{k_{II}a} - e^{-k_{II}a})^2}{16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right)} \right]^{-1} = \left[1 + \frac{\sinh^2 k_{II}a}{4 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right)} \right]^{-1} \quad (6-49)$$

donde

$$k_{II}a = \sqrt{\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right)} \quad E < V_0$$

Si los exponentes son muy grandes esta fórmula se reduce a

$$T \simeq 16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right) e^{-2k_{II}a} \quad k_{II}a \gg 1 \quad (6-50)$$

lo cual es fácilmente verificable. Cuando (6-50) es una buena aproximación, T es extremadamente pequeña.

Estas ecuaciones hacen una predicción que, desde el punto de vista de la mecánica clásica, es muy importante. Dicen que una partícula de masa m y energía total E que incide sobre una barrera de potencial de altura $V_0 > E$ y ancho finito a , tiene cierta probabilidad T de penetrar la barrera y aparecer del otro lado. A este fenómeno se le llama *penetración de barrera* y se dice que la partícula *hizo un túnel* a través de la barrera. Por supuesto que T es extremadamente pequeña en el límite clásico, ya que en tal límite la cantidad $2mV_0a^2/\hbar^2$, que es una medida de la opacidad de la barrera, es extremadamente grande.

En breve se estudiará en detalle la penetración de barrera, pero primero se terminarán de describir los cálculos, considerando el caso en el cual la energía de la partícula es mayor que la altura de la barrera, es decir, el caso:

$$E > V_0$$

En este caso la eigenfunción es oscilatoria en las tres regiones, pero de longitud de onda mayor en la región de la barrera, $0 < x < a$. La evaluación de las constantes B , C , F y G mediante la aplicación de las condiciones de continuidad en $x = 0$ y $x = a$, conducen a la fórmula siguiente para el coeficiente de transmisión

$$T = \frac{v_1 C^* C}{v_1 A^* A} = \left[1 - \frac{(e^{ik_{III}a} - e^{-ik_{III}a})^2}{16 \frac{E}{V_0} \left(\frac{E}{V_0} - 1\right)} \right]^{-1} = \left[1 + \frac{\sin^2 k_{III}a}{4 \frac{E}{V_0} \left(\frac{E}{V_0} - 1\right)} \right]^{-1} \quad (6-51)$$

donde

$$k_{III}a = \sqrt{\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} \left(\frac{E}{V_0} - 1 \right)} \quad E > V_0$$

Ejemplo 6-4. Un electrón incide sobre una barrera de potencial rectangular de altura $V_0 = 10 \text{ eV}$ y ancho $a = 1.8 \times 10^{-10} \text{ m}$. Esta barrera rectangular es una idealización de la barrera que encuentra un electrón, al ser dispersado por un átomo de gas ionizado negativamente en el "plasma" de un gas de un tubo de descarga. La barrera real no es rectangular pero es aproximadamente de la altura y ancho mencionados. Evaluar el coeficiente de transmisión T y el coeficiente de reflexión R como una función de la energía total E del electrón.

Del ejemplo 6-2 se puede ver que si E es una función razonable de V_0 la longitud de penetración Δx será comparable al ancho de la barrera a . Entonces se puede esperar una transmisión apreciable a través de la barrera. Para determinar exactamente qué tanto se transmite, se utilizan los números dados para evaluar la combinación de parámetros

$$\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} \simeq \frac{2 \times 9 \times 10^{-31} \text{ kg} \times 10 \text{ eV} \times 1.6 \times 10^{-19} \text{ joule/eV} \times (1.8)^2 \times 10^{-20} \text{ m}^2}{10^{-68} \text{ joule}^2\text{-seg}^2} \simeq 9$$

que intervienen en (6-49). Con lo cual es posible graficar T y también $R = 1 - T$, contra E/V_0 , en el intervalo $0 \leq E/V_0 \leq 1$. La gráfica se muestra en la figura 6-15. Se ve que T es muy pequeña cuando $E/V_0 \ll 1$. Pero cuando E/V_0 sólo es algo menor que uno, de modo que E es casi tan grande como V_0 , T no es nada despreciable. Por ejemplo, cuando E es la mitad de V_0 así que $E/V_0 = 0.5$, el coeficiente de transmisión tiene el valor $T \simeq 0.05$ que es apreciable y que muestra que los electrones pueden penetrar esta barrera con relativa facilidad.

Para $E/V_0 > 1$ y de la ecuación (6-51) se evalúa T y $R = 1 - T$ utilizando la misma combinación de parámetros que se usó con anterioridad. Los resultados también se muestran en la figura 6-15. Para $E/V_0 > 1$ el coeficiente de transmisión T es en general algo menor que uno, permitiendo la

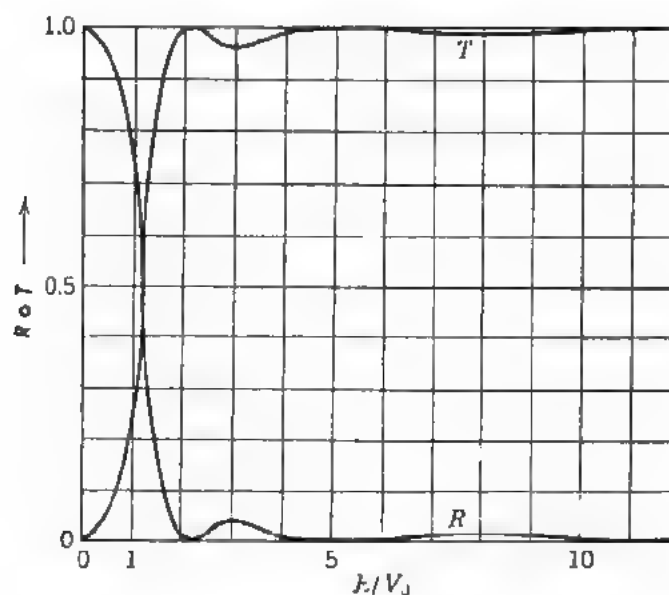


FIGURA 6-15

Coeficientes de transmisión y reflexión T y R para una partícula que incide sobre una barrera de potencial de altura V_0 y espesor a , tal que $2mV_0a^2/\hbar^2 = 9$. La abscisa E/V_0 es la relación de la energía total de la partícula a la altura de la barrera de potencial.

reflexión en las discontinuidades del potencial. Sin embargo, de (6-51) se ve que $T = 1$ siempre que $k_{III}a = \pi, 2\pi, 3\pi, \dots$ lo cual es simplemente la condición de que la longitud de la región de la barrera, a , sea igual a un número entero o semientero de longitudes de onda de de Broglie $\lambda_{III} = 2\pi/k_{III}$. Para esta barrera en particular, los electrones de energía $E \simeq 21$ eV, 53 eV, etc., satisfacen la condición $k_{III}a = \pi, 2\pi$, etc., y, por lo tanto, pasan a la región $x > a$ sin ninguna reflexión. El efecto es un resultado de interferencia constructiva entre las reflexiones en $x = 0$ y $x = a$ y están íntimamente relacionadas con el efecto Ramsauer observado en la dispersión de electrones de baja energía por átomos de gases nobles, en los cuales los electrones de ciertas energías, en el rango de unos pocos electronvolts, pasan a través de estos átomos como si estos estuvieran y por lo tanto tienen coeficientes de transmisión igual a uno. Esencialmente en la dispersión de neutrones se ve el mismo efecto, siendo éste entre los núcleos y los neutrones con energías de unos cuantos MeV. El efecto nuclear, denominado *resonancia por tamaño*, se analizará posteriormente en este libro. ◀

Se pueden unir los resultados de las tres últimas secciones para comparar la gráfica de la dependencia del coeficiente de reflexión R con la energía, para el caso de una barrera de potencial, en la figura 6-15, con la gráfica de lo mismo para el caso de un potencial escalón, en la figura 6-11. La comparación muestra que para ambos potenciales $R \rightarrow 1$ conforme $E/V_0 \rightarrow 0$, y $R \rightarrow 0$ conforme $E/V_0 \rightarrow \infty$, ocurriendo un decremento de R alrededor de $E/V_0 = 1$. Pero para la barrera de potencial el coeficiente de reflexión se aproxima gradualmente a uno para energías pequeñas, ya que el espesor finito de la región clásicamente excluida permite alguna transmisión. También el coeficiente de reflexión en la barrera de potencial oscila para energías grandes, debido a las interferencias en estas reflexiones provenientes de sus dos discontinuidades. Como el potencial escalón se puede considerar como caso límite de una barrera sumamente ancha, es posible verlo de la comparación que se hizo del comportamiento del coeficiente de reflexión en la barrera de potencial en este límite.

A continuación se discutirán en algún detalle los orígenes de estos resultados. Todos ellos incluyen fenómenos que provienen del comportamiento ondulatorio del movimiento de partículas microscópicas y cada uno de los fenómenos también se observa en otros tipos de movimiento ondulatorio. Como se comentó en el capítulo 5, la ecuación diferencial independiente del tiempo que gobierna el movimiento ondulatorio clásico es de la misma forma que la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Por ejemplo, la radiación electromagnética de frecuencia ν que se propaga a través de un medio con índice de refracción μ obedece la ecuación

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \left(\frac{2\pi\nu}{c}\mu\right)^2\psi(x) = 0 \quad (6-52)$$

donde la función $\psi(x)$ especifica la magnitud del campo eléctrico o magnético. Cuando se compara ésta con la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo escrita en la forma

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]\psi(x) = 0$$

se ve que éstas son idénticas si el índice de refracción en la primera, está conectado con la función energía potencial en la segunda mediante la relación

$$\mu(x) = \frac{c}{2\pi\nu} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]} \quad (6-53)$$

Entonces el comportamiento de un sistema óptico con índice de refracción $\mu(x)$ debería de ser idéntico al comportamiento de un sistema mecánico con energía potencial $V(x)$, siempre que las dos funciones estén relacionadas mediante (6-53). En efecto, existen fenómenos ópticos que

son análogos exactamente a alguno de la mecánica cuántica que aparece al considerar el movimiento de una partícula no ligada. Un fenómeno óptico completamente análogo a la transmisión total de partículas sobre barreras de longitud igual a un número entero o semientero de longitudes de onda, se utiliza en el recubrimiento de lentes con objeto de obtener transmisiones muy luminosas y en películas delgadas como filtros ópticos.

Un análogo óptico de la penetración de barreras por partículas son los índices de refracción imaginarios que aparecen en la reflexión total interna. Considérese un rayo de luz que incide sobre una interfase vidrio-aire a un ángulo mayor que el ángulo crítico θ_c . Al comportamiento resultante del rayo de luz se le llama *reflexión total interna* y se ilustra en la parte inferior de la figura 6-16. Un tratamiento detallado del proceso en términos de la teoría electromagnética muestra que el índice de refracción, medido a lo largo de la línea ABC , es real en la región AB pero imaginario en la región BC . Obsérvese que (6-53) sugiere una $\mu(x)$ imaginaria para una región análoga a una en la cual $E < V(x)$. Además, la teoría electromagnética muestra que existen vibraciones electromagnéticas en la región BC con exactamente la misma forma que la onda estacionaria con exponencial decreciente de (6-29) para la región en la que $E < V(x)$. El flujo de energía (el vector de Poynting) es igual a cero en esta onda estacionaria electromagnética, de la misma manera como el flujo de probabilidad es cero en la onda estacionaria mecánico-cuántica, de modo que el rayo de luz es totalmente reflejado. Sin embargo, si se coloca un segundo bloque de vidrio suficientemente cerca del primer bloque como para que esté en la región en la cual las vibraciones electromagnéticas permanezcan apreciables, estas vibraciones serán recogidas y se propagarán a través del segundo bloque. Además las vibraciones electromagnéticas en la brecha de aire llevan ahora un flujo de energía hasta el segundo bloque. Este fenómeno, llamado *reflexión total interna frustrada*, se ilustra en la parte inferior de la figura 6-16. En la mecánica cuántica sucede esencialmente lo mismo cuando la región en la cual $E < V(x)$ se reduce de un ancho infinito (potencial escalón) a un ancho finito (barrera de potencial). La transmisión de la luz a través de una brecha de aire a un ángulo de incidencia mayor que el ángulo crítico fue observado por primera vez por Newton hacia 1700. La ecuación que relaciona la intensidad del haz transmitido con el espesor de la

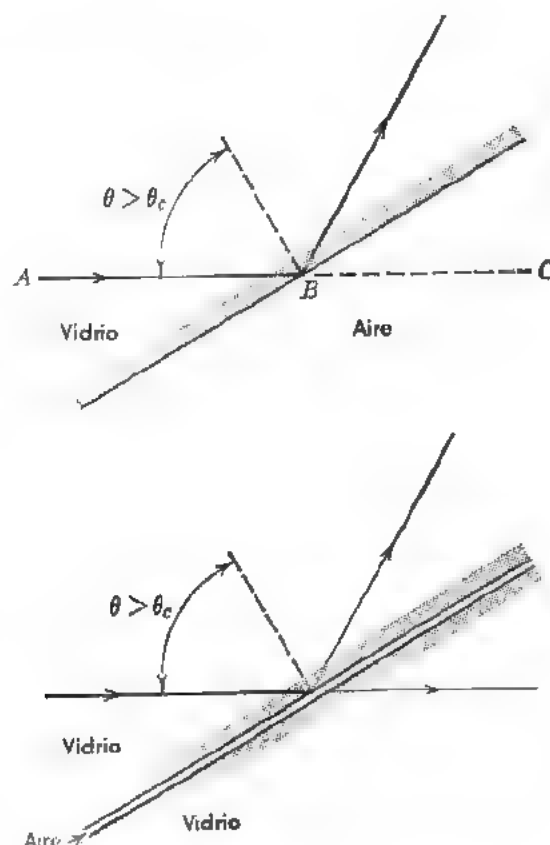


FIGURA 6-16

Arriba: Ilustración de reflexión total interna de un rayo de luz. El ángulo de incidencia es mayor que el ángulo crítico. *Abajo:* Ilustración de la reflexión total interna frustrada. Algo del rayo de luz se transmite a través de la brecha de aire si la brecha es lo suficientemente fina.

brecha de aire y otros parámetros, es idéntica en forma a la ecuación (6-49) y ha sido verificada experimentalmente.

Es particularmente fácil observar la reflexión total interna frustrada en las ondas electromagnéticas, utilizando la región de microondas del espectro y dos bloques de parafina separados por una brecha de aire. Es más, una inspección cuidadosa de las fotografías del "tanque de ondas" de las figuras 6-17 y 6-18 mostrará que el fenómeno se puede observar con ondas de agua. La reflexión total interna frustrada o su equivalente mecánico-cuántico que es la penetración de la barrera, proviene de las propiedades comunes a todas las formas de movimiento ondulatorio ya sean clásicas o mecánico-cuánticas.

6.6 Ejemplos de penetración de barrera por partículas

Existen un número de ejemplos importantes e interesantes de la penetración de barreras por partículas microscópicas. Un ejemplo muy difundido pero poco conocido se encuentra en el alambrado de una casa,

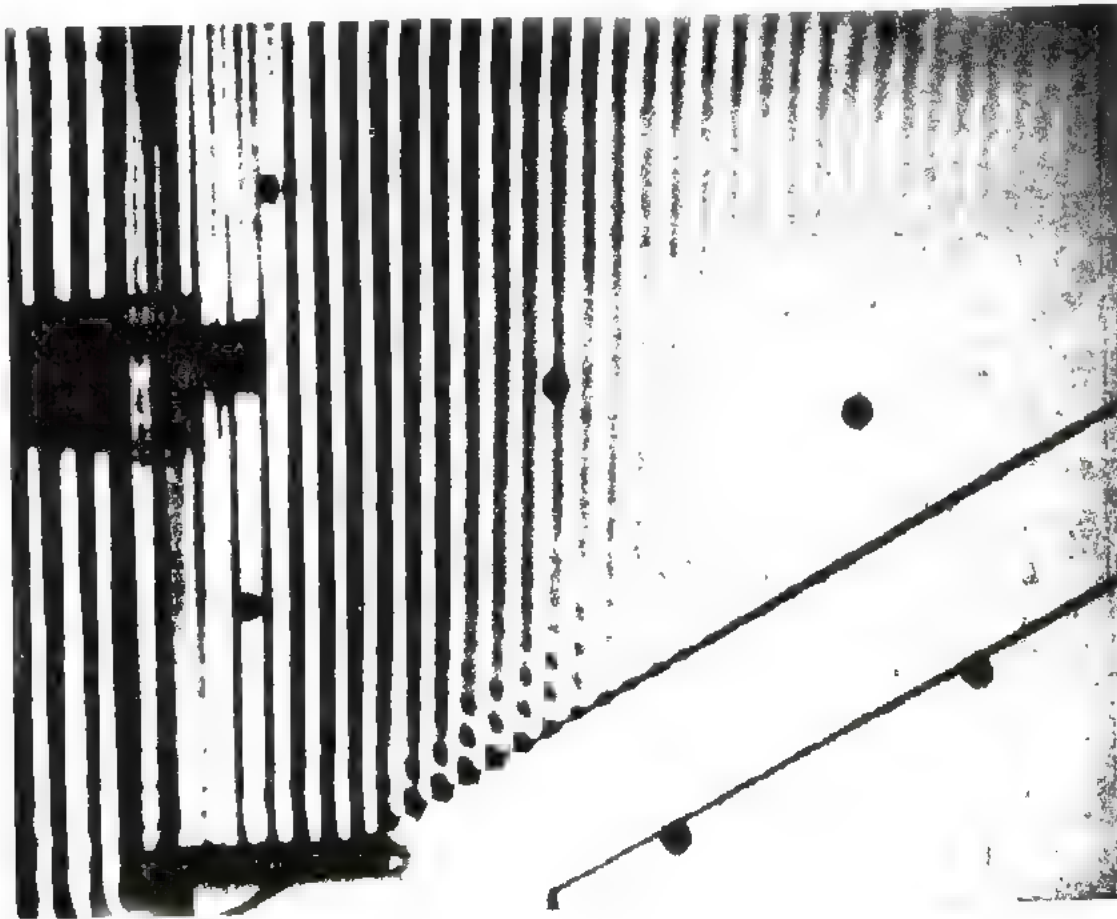
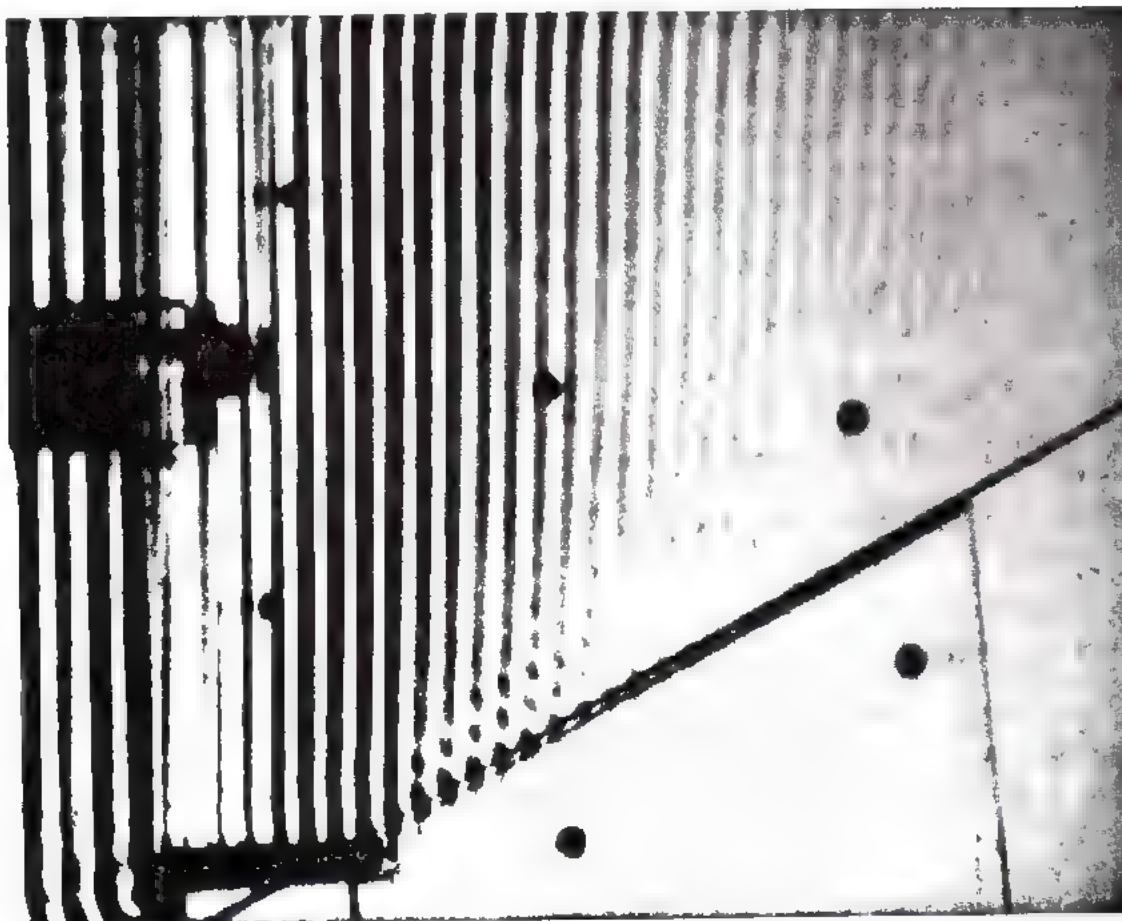


FIGURA 6-17

Reflexión total interna de ondas de agua. Un vibrador largo situado a la izquierda produce un conjunto de ondas en una región de poca profundidad, se han iluminado las ondas para hacer sus crestas fácilmente visibles. Las ondas son reflejadas totalmente en la frontera diagonal de una región donde la capa de agua se hace bruscamente profunda, esta reflexión ocurre debido a que la velocidad de las ondas de agua dependen de la profundidad de ésta. Observe que la intensidad de las ondas decrece rápidamente cuando tratan de penetrar en una región de mayor profundidad, pero existe algo de penetración en esta región. (Cortesía de Film Studio, Education Development Center).

**FIGURA 6-18**

Reflexión total interna frustrada de ondas de agua. Cuando la región de más profundidad produce una brecha lo suficientemente fina, las ondas que han penetrado en la región más profunda se levantan y transmiten a una segunda región de poca profundidad. (Cortesía de Film Studio, Education Development Center).

La forma usual en la que un electricista junta dos alambres es torciéndolos juntos. Invariablemente existe una capa de óxido de cobre entre los dos alambres y este material es un aislante efectivo. Afortunadamente, la capa es tan delgada que los electrones que fluyen por el alambre son capaces de hacer un túnel a través de la capa mediante penetración de barrera.

A través de la Historia, la primera aplicación de la teoría de la mecánica cuántica de la penetración de barrera por partículas fue explicar una vieja paradoja concerniente con la emisión de partículas α en el decaimiento de núcleos radiactivos. Como un ejemplo típico considérese el núcleo de U^{238} . La energía potencial $V(r)$ de una partícula α a una distancia r desde el centro del núcleo había sido investigada mediante experimentos de dispersión realizados por 1910 por Rutherford y otros. Utilizando como prueba las partículas α de 8.8 MeV emitidas por el núcleo radiactivo de Po^{212} , se observó que la probabilidad de dispersión a distintos ángulos por el núcleo de U^{238} estaba de acuerdo con las predicciones de la fórmula de dispersión de Rutherford (vista en el capítulo 4). El lector recordará que la fórmula está basada en la suposición de que la interacción entre la partícula α y el núcleo sigue estrictamente la ley de Coulomb repulsiva que debería esperarse operara entre dos objetos esféricos cargados positivamente. Entonces Rutherford fue capaz de concluir que, para el núcleo de U^{238} , la función potencial $V(r)$ que experimentaba una partícula α vecina seguía la ley de Coulomb $V(r) = 2Ze^2/4\pi\epsilon_0 r$, donde $2e$ es la carga de la partícula α y Ze es la carga nuclear. Al menos ésta es la energía para distancias mayores que $r'' = 3 \times 10^{-14} m$ donde $V(r'') = 8.8 \text{ MeV}$, para la partícula α de prueba. También se sabía por la dispersión de partículas α por núcleos de átomos ligeros que $V(r)$ eventualmente se aparta de la ley $1/r$ cuando $r < r'$, el radio del núcleo, a pesar de que en aquel tiempo no se conocía el valor exacto de r' para los núcleos de átomos pesados. Además puesto que ocasionalmente las partículas α son emitidas por el

núcleo de U^{238} se supuso que éstas existían en el interior de este núcleo al cual normalmente están ligadas por el potencial $V(r)$. De estos argumentos se concluyó que la forma de $V(r)$ en la región $r < r''$ debería ser cualitativamente como se indica en la figura 6-19. Estas conclusiones han podido verificarse mediante experimentos modernos que utilizan la dispersión de partículas α producidas en ciclotrones con una energía lo suficientemente grande como para permitir la investigación del potencial sobre todo el intervalo de r completo.

La paradoja estaba conectada con el hecho de que también se conocía que la energía cinética de las partículas α emitidas en el decaimiento radiactivo del U^{238} era 4.2 MeV. Por supuesto que la energía cinética era medida a una distancia muy grande desde el núcleo donde $V(r) = 0$ y la energía cinética total es igual a la energía total E . Este valor de la constante de la energía total de la partícula α emitida en el decaimiento del U^{238} se muestra también en la figura 6-19. Desde el punto de vista de la mecánica clásica la situación fue ciertamente paradójica. Una partícula α de energía total E está inicialmente en la región $r < r'$; esta región está separada del resto del espacio por una barrera de potencial cuya altura se sabía que al menos era el doble de E y se observó que, ocasionalmente, la partícula α penetraba la barrera y se movía hacia valores grandes de r .

Puesto de otra manera, de acuerdo con la mecánica clásica una partícula α emitida desde una región en la que la función energía potencial tiene la forma mostrada en la figura 6-19, debería necesariamente tener una energía cinética mucho mayor de la que en realidad se le observa cuando se encuentra lejos de la región. La razón es simplemente que en la mecánica clásica la energía total debería ser mayor que el valor máximo de la energía potencial, para que la partícula escape de la barrera. Considérese la analogía siguiente. Usted pasea por debajo de un puente alto sin ver hacia arriba, repentinamente le pega en la cabeza un ladrillo con un golpe suave.

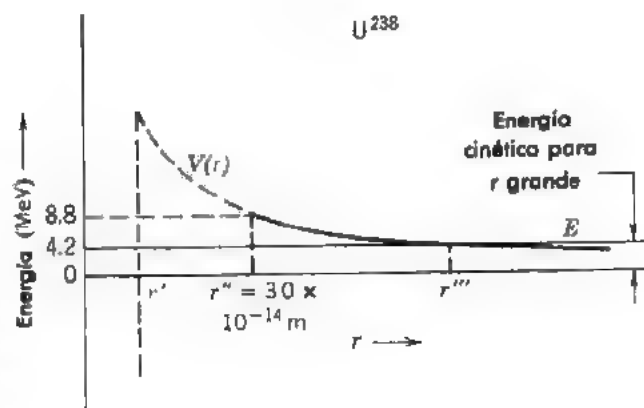
No existe lugar de donde provenga el ladrillo excepto del puente, pero un ladrillo cayendo de tal altura debería desarrollar energía cinética suficiente como para matarlo.

En 1928 Gamow, Condon y Gurney trataron la emisión de partículas α como un problema mecánico cuántico de penetración de barrera. Supusieron que $V(r) = 2Ze^2/4\pi\epsilon_0 r$ para $r > r'$ donde $2e$ es la carga de la partícula α y Ze es la carga del núcleo remanente después de haber sido emitida la partícula α , también supusieron que $V(r) < E$ para $r < r'$ tal como se muestra en la figura 6-19. Para evaluar el coeficiente de transmisión T se utilizó la ecuación (6-50) ya que el exponente $k_{11}a$, que determina a T , tiene un valor grande comparado con uno. De hecho, el exponente es tan grande que la exponencial domina completamente el comportamiento de T y es suficiente tomar

$$T \simeq e^{-2k_{11}a} = e^{-2\sqrt{(2m/\hbar^2)(V_0-E)}a} \quad (6-54)$$

FIGURA 6-19

La energía potencial V que actúa sobre una partícula α a una distancia r del centro de un núcleo de U^{238} y la energía total E de una partícula α emitida por un núcleo radiactivo. La parte sólida de la curva de potencial se conoció a partir de medidas de dispersión que siguen una ley de Coulomb hasta la distancia de máximo acercamiento r'' de una partícula α de 8.8 MeV. La parte punteada de la curva muestra que el potencial se supuso continuo para seguir una ley de Coulomb hasta el radio nuclear r' donde debería caer muy rápidamente para formar una región de enlace. Una partícula α de 4.2 MeV emitida por un núcleo radiactivo debería penetrar la barrera de potencial desde el radio nuclear r' al punto a distancia r''' desde el centro donde la energía potencial V resulta menor que su energía total E .



Esta expresión fue derivada para una barrera rectangular de altura V_0 y ancho a , pero cuando la expresión es válida se puede aplicar a la barrera $V(r)$ considerándola como un conjunto de barreras rectangulares adyacentes de altura $V(r_i)$ y ancho sumamente pequeño Δr_i . En el límite, este razonamiento conduce a la expresión

$$T \simeq e^{-2 \int_{r'}^{r''} \sqrt{(2m/\hbar^2)[V(r) - E]} dr} \quad (6-55)$$

donde la integración se toma desde el radio nuclear r' donde $V(r)$ es superior a E , al radio r'' donde $V(r)$ está por debajo de E . Esta justificado utilizar (6-54), que fue derivada para el caso unidimensional, en (6-55) que es una expresión para un problema tridimensional, debido a que las partículas α casi siempre se emiten con impulso angular cero. Esto es, esencialmente se mueve a lo largo de trayectorias rectilíneas que emergen del centro del núcleo y, por lo tanto, obedecen ecuaciones que esencialmente son unidimensionales.

La cantidad T da la probabilidad de que una partícula α penetre la barrera en un intento. Se puede estimar que el número de intentos por segundo sería

$$N \simeq \frac{v}{2r'} \quad (6-56)$$

si se supusiera que una partícula α es rebotada con una velocidad v en el interior del núcleo de diámetro $2r'$. Entonces la probabilidad por segundo de que un núcleo decaiga por la emisión de una partícula α , llamada la razón de decaimiento R , sería

$$R \simeq \frac{v}{2r'} e^{-2 \int_{r'}^{r''} \sqrt{(2m/\hbar^2)(2Ze^2/4\pi\epsilon_0 r - E)} dr} \quad (6-57)$$

Actualmente se sabe que (6-56) no es una estimación precisa, pero esta función o su forma más correcta, varía tan lentamente en comparación con la rápida variación en la exponencial que el resultado expresado por (6-57) es una estimación precisa.

Al aplicar (6-57) a un núcleo radiactivo particular, Gamow, Condon y Gurney tomaron como conocidas todas las cantidades en la expresión, a excepción de v y r' (r'' se puede evaluar a partir de Z y E). Suponiendo a v comparable con la velocidad de la partícula α después de la emisión es decir $mv^2/2 = E$, la razón de decaimiento R es entonces solamente una función del radio nuclear r' . Utilizando $r' = 9 \times 10^{-15}$ m, que ciertamente estaba dentro de los valores obtenidos por Rutherford los análisis de la dispersión de partículas α por núcleos ligeros, obtuvieron valores de R que estaban en concordancia con aquellos medidos experimentalmente, a pesar de que la razón de decaimiento varía sobre un intervalo *tremendamente* grande. Como un ejemplo, la razón de decaimiento para U^{238} , es $R = 5 \times 10^{-18} \text{ seg}^{-1}$. Un ejemplo en el otro extremo es Po^{212} para el cual $R = 2 \times 10^6 \text{ seg}^{-1}$. Esta variación en R se debe principalmente a la variación de un núcleo radiactivo al siguiente, de la energía E de las partículas α emitidas. La altura de la barrera y el radio nuclear no cambian de manera significativa para los núcleos en el intervalo limitado de la tabla periódica en el cual se encuentran los núcleos emisores de α . En la figura 6-20 se muestra una comparación entre el experimento y la teoría. La exitosa aplicación de la mecánica cuántica de Schrödinger a la emisión paradójica de partículas constituye una de sus primeras y más convincentes verificaciones.

La penetración de barrera de átomos tiene lugar en la *inversión* periódica de la molécula de amoníaco, NH_3 . La figura 6-21 muestra esquemáticamente la estructura de esta molécula que consiste de tres átomos de H arreglados en un plano y equidistantes del átomo de N ; existen dos posiciones de equilibrio completamente equivalentes para el átomo de N , una a cada lado del plano que contiene a los átomos de H . La figura 6-22 indica la energía potencial que actúa sobre el átomo de N como una función de su distancia x desde el plano. La función potencial $V(x)$ tiene dos mínimos, que corresponden a las dos posiciones de equilibrio y que están dispuestos simétricamente alrededor de un máximo relativo localizado en $x = 0$. Este máximo, que constituye una barrera que separa las dos regiones de enlace, proviene de las fuerzas de Coulomb repulsivas que actúan sobre el átomo de N cuando éste penetra al plano de los átomos de H . Las fuerzas son lo suficientemente intensas como para que en la mecánica clásica el átomo de N no sea capaz de cruzar la barrera si la molécula se encuentra en uno de sus estados de baja energía; es decir, las energías más bajas permitidas de este potencial de enlace están por debajo de la cima de la

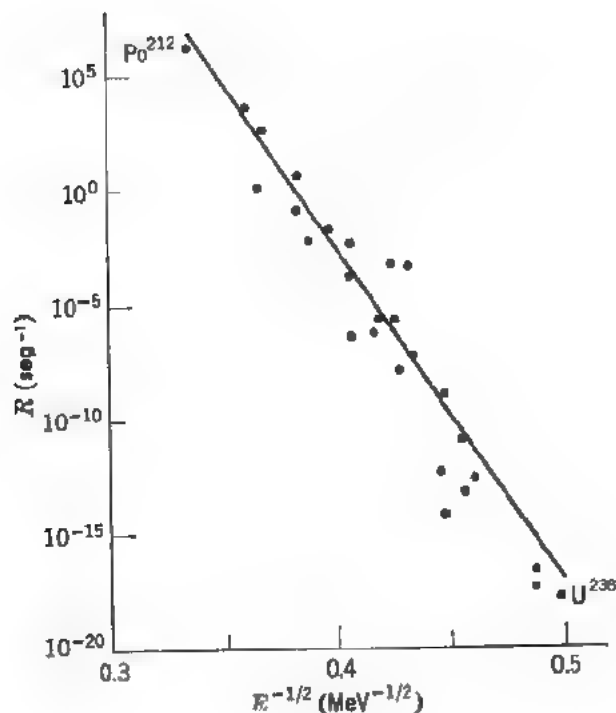


FIGURA 6-20

Probabilidad por segundo R de que un núcleo radiactivo emita una partícula α de energía E . Los puntos son mediciones experimentales y la curva sólida es la predicción de (6-57) como resultado de la teoría de la penetración de barrera.

barrera, tal y como se indica en la figura. Pero la penetración de la región clásicamente excluida permite que el átomo de N pase a través de la barrera. Si inicialmente se encontraba en un lado, hará un túnel y eventualmente aparecerá en el otro y después lo repetirá en la dirección opuesta. En realidad el átomo de N oscila yendo y viniendo a través del plano de los átomos de H . La frecuencia de oscilación es $\nu = 2.3786 \times 10^{10}$ Hz, cuando la molécula está en su estado base. Esta frecuencia es mucho menor que la encontrada en vibraciones moleculares que no presentan penetración de barrera o en otros fenómenos atómicos moleculares. Debido a las simplificaciones técnicas que resultaron, la frecuencia se utilizó como un patrón en los primeros relojes atómicos que miden el tiempo con precisión máxima.

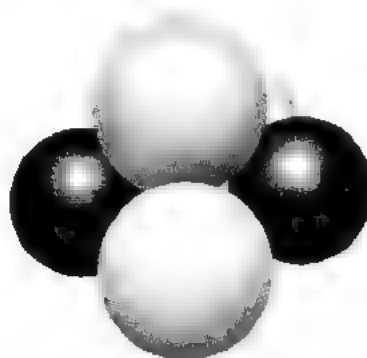
Un ejemplo reciente y muy útil de la penetración de barrera por electrones se presenta en el *diodo túnel*, que es un dispositivo semiconductor, como un transistor, y que se utiliza en los circuitos electrónicos rápidos ya que su respuesta a alta frecuencia es mucho mejor que la de cualquier transistor. La operación de un diodo túnel se explicará en el capítulo 13 dentro del contexto de un análisis sobre semiconductores. De modo que aquí sólo se dirá que el dispositivo utiliza penetración de barrera controlable para interrumpir corrientes tan rápidamente, que se puede utilizar para hacer un oscilador que pueda operar a frecuencias superiores a 10^{11} Hz.

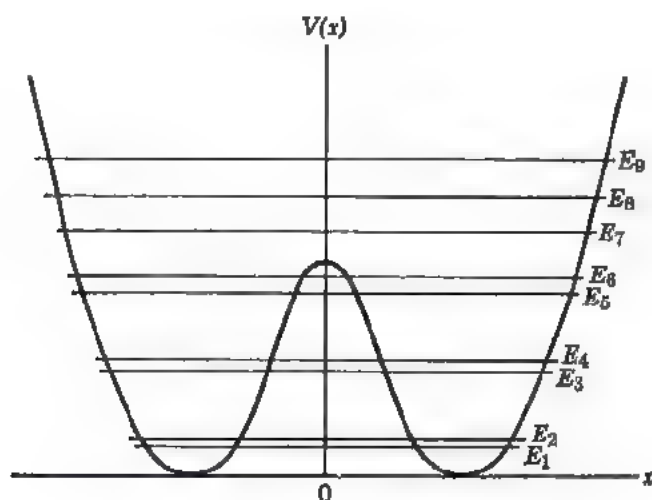
6.7 Potencial de pozo cuadrado

En las secciones anteriores se ha tratado el movimiento de partículas en potenciales que son incapaces de ligar la partícula a regiones limitadas del espacio. También se han presentado un

FIGURA 6-21

Ilustración esquemática de la molécula de NH_3 . Las esferas claras representan los tres átomos de H arreglados en un plano. Las esferas oscuras representan dos posiciones de equilibrio equivalentes del átomo de N solo.



**FIGURA 6-22**

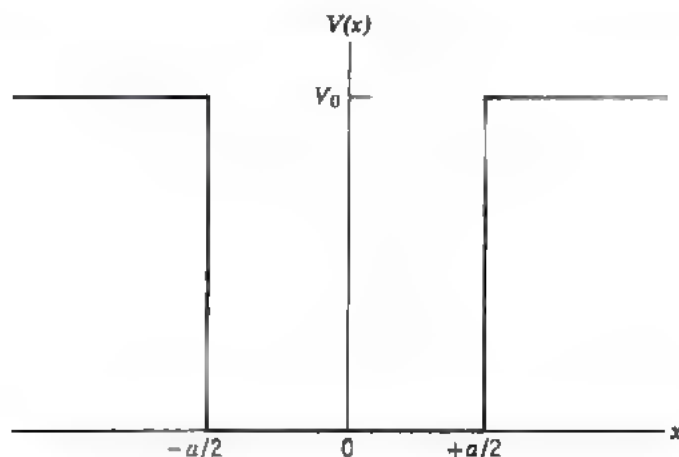
La energía potencial del átomo de N en la molécula de NH_3 como una función de su distancia al plano que contiene los tres átomos de H y que está en $x=0$. En su estado de energía más bajo, la energía total de la molécula está por debajo de la cima de la barrera que separa los dos mínimos, como se indica por los eigenvalores del potencial mostrados en la figura.

número de fenómenos cuánticos interesantes en los que no ocurre la cuantización de la energía. Por supuesto que del análisis cualitativo del último capítulo se desprende que sólo se puede esperar la cuantización de la energía para potenciales que son capaces de ligar a una partícula. En esta sección se estudiará uno de los potenciales más simples que tienen esta propiedad, el *potencial de pozo cuadrado*.

El potencial se puede escribir

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & x < -a/2 \text{ o } x > +a/2 \\ 0 & -a/2 < x < +a/2 \end{cases} \quad (6-58)$$

La ilustración de la figura 6-23 indica el origen de su nombre. Si la partícula tiene una energía total $E < V_0$, entonces según la *mecánica clásica* sólo puede estar en la región $-a/2 < x < +a/2$

**FIGURA 6-23**

Un pozo de potencial.

+ $a/2$ (dentro del pozo). La partícula está ligada a esta región y va y viene entre los extremos de ella con impulso de magnitud constante pero dirección alterna. Además, cualquier valor $E \geq 0$ de la energía total es posible. Pero en la *mecánica cuántica* solamente son posibles ciertos valores de la energía total separados discretamente.

Con frecuencia se utiliza en la mecánica cuántica el potencial de pozo cuadrado para representar una situación en la cual una partícula se mueve en una región restringida del espacio bajo la influencia de las fuerzas que lo mantienen en la región. A pesar de que este potencial simplificado pierde alguno de los detalles del movimiento, mantiene el rasgo esencial de ligar la partícula por fuerzas de cierta intensidad a una región de cierto tamaño. Del estudio del ejemplo 6-2 resulta que el representar al potencial que actúa sobre un electrón de conducción en un bloque de metal por un pozo cuadrado es una buena aproximación. La profundidad del pozo es aproximadamente 10 eV y su ancho es igual al ancho del bloque. La figura 6-24 indica, desde un punto de vista diferente al utilizado en el ejemplo 6-2, la manera de obtener algo como un pozo cuadrado mediante la superposición de los potenciales producidos por los iones positivos que se encuentran sumamente próximos en el metal. En el ejemplo 6-3 se indica que el movimiento de un neutrón en un núcleo se puede aproximar suponiendo que la partícula se encuentra en un pozo de potencial cuadrado con una profundidad de aproximadamente 50 MeV. Las dimensiones lineales del potencial son iguales al diámetro nuclear que es aproximadamente de 10^{-14} m.

El tratamiento principia por considerar cualitativamente la forma de las eigenfunciones que son soluciones a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el pozo de potencial cuadrado de (6-58). Como en las secciones anteriores el problema se descompone en tres regiones: $x < -a/2$ (a la izquierda del pozo), $-a/2 < x < +a/2$ (interior del pozo) y $x > +a/2$ (a la derecha del pozo). La llamada *solución general* a la ecuación general para la región interior del pozo es

APÉNDICE G

$$\psi(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \quad \text{donde } k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad -a/2 < x < +a/2 \quad (6-59)$$

El primer término describe ondas que viajan en la dirección en la que x crece y el segundo describe ondas viajeras en la dirección en la que x decrece. (Esta solución fue derivada en la sección 6-2. Si el lector no ha visto esa sección, puede demostrar con facilidad que (6-59) es una solución a la ecuación de Schrodinger independiente del tiempo para cualesquiera valores de las constantes arbitrarias A y B , substituyéndola en (6-2).

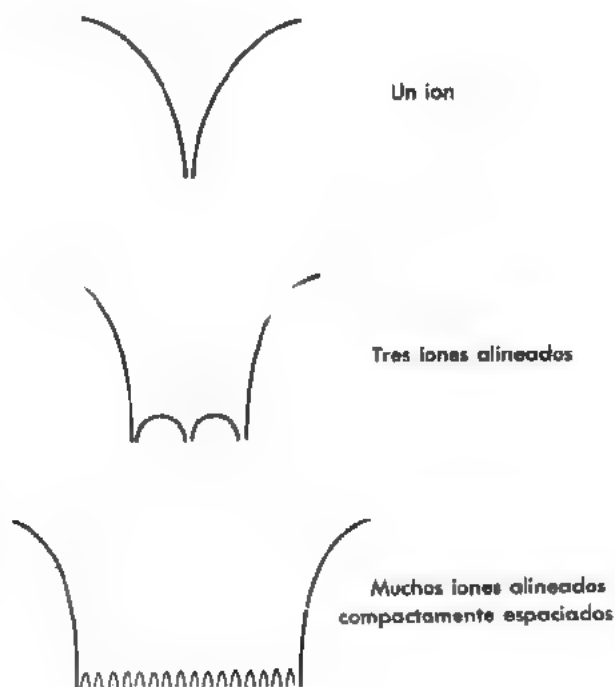


FIGURA 6-24

Indicación cuantitativa de como una aproximación a un pozo de potencial cuadrado resulta de la superposición de potenciales que actúan sobre un electrón de conducción en un metal. Los potenciales se deben a los iones positivos estrechamente espaciados en el metal.

Ahora, la descripción clásica de la partícula rebotando hacia adelante y hacia atrás dentro del pozo, sugiere que la eigenfunción en esta región debería corresponder a una mezcla igual de ondas que viajan en ambas direcciones. Las ondas viajeras dirigidas en oposición y de igual amplitud se combinarán para formar una onda estacionaria, lo cual se puede obtener haciendo iguales las constantes arbitrarias, es decir $A = B$; lo cual produce

$$\psi(x) = B(e^{ik_1x} + e^{-ik_1x})$$

que se puede escribir

$$\psi(x) = B' \frac{e^{ik_1x} + e^{-ik_1x}}{2}$$

donde B' es una nueva constante arbitraria definida por la relación $B' = 2B$. Pero esta combinación de exponenciales complejas simplemente da

$$\psi(x) = B' \cos k_1x \quad \text{donde } k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (6-60)$$

Esta eigenfunción describe una onda estacionaria ya que una inspección de la función de onda asociada $\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$ demuestra que tiene nodos en las posiciones fijas en las que $\cos k_1x = 0$.

También es posible obtener una onda estacionaria haciendo $-A = B$, lo cual produce

$$\psi(x) = A(e^{ik_1x} - e^{-ik_1x})$$

que se puede escribir

$$\psi(x) = A' \frac{e^{ik_1x} - e^{-ik_1x}}{2i}$$

donde A' es una nueva constante arbitraria definida por $A' = 2iA$. Pero esto es justamente

$$\psi(x) = A' \sin k_1x \quad \text{donde } k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (6-61)$$

Puesto que tanto (6-60) como (6-61) son soluciones a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el mismo valor de E y puesto que la ecuación diferencial es lineal en $\psi(x)$, su suma también es solución; como se puede verificar por substitución directa.

$$\psi(x) = A' \sin k_1x + B' \cos k_1x \quad \text{donde } k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad -a/2 < x < +a/2 \quad (6-62)$$

En efecto, esta es una *solución general* a la ecuación diferencial para la región *interna* al pozo, y puesto que contiene dos constantes arbitrarias, es una solución tan general como lo es la (6-59). Matemáticamente las dos son completamente equivalentes. Sin embargo, es más conveniente utilizar (6-62) en los problemas que involucran el movimiento de partículas ligadas. Físicamente, se puede pensar en (6-62) como la descripción de una situación en la cual una partícula se mueve de tal manera que se conoce con precisión que la magnitud de su impulso es $p = \hbar k_1 = \sqrt{2mE}$, pero cuya dirección puede ser la dirección de crecimiento o de disminución de x .

Considérense ahora las soluciones a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en las dos regiones *externas* al pozo potencial: $x < -a/2$ y $x > +a/2$. En estas regiones las *soluciones generales* tienen las formas

$$\psi(x) = Ce^{k_{II}x} + De^{-k_{II}x} \quad \text{donde } k_{II} = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad x < -a/2 \quad (6-63)$$

y

$$\psi(x) = Fe^{k_{II}x} + Ge^{-k_{II}x} \quad \text{donde } k_{II} = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad x > +a/2 \quad (6-64)$$

Las dos formas de $\psi(x)$ describen las ondas estacionarias en la región externa al pozo, ya que en la función de onda asociada $\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$ las dependencias con x y con t ocurren como factores separados. Estas ondas estacionarias no tienen nodos, pero se juntan con las ondas estacionarias del interior del pozo que sí tienen nodos. (En la sección 6-3 se derivaron las soluciones generales. Su validez para cualesquiera valores de las constantes arbitrarias C, D, F , y G puede verificarse fácilmente por substitución en (6-13)).

En cada una de las tres regiones de x se pueden construir las eigenfunciones válidas para toda x uniendo las formas supuestas para las soluciones generales a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Estas tres formas contienen seis constantes arbitrarias: A', B', C, D, F , y G . Ahora, puesto que una eigenfunción aceptable debería permanecer finita en cualquier parte, es posible ver que deberán hacerse $D = 0$ y $F = 0$. Si esto no se hiciera la segunda exponencial en (6-63) haría $\psi(x) \rightarrow \infty$ cuando $x \rightarrow -\infty$, y la primera exponencial en (6-64) debería ser $\psi(x) \rightarrow \infty$ conforme $x \rightarrow +\infty$. Es posible obtener cuatro ecuaciones más que contengan a las constantes arbitrarias restantes demandando que $\psi(x)$ y $d\psi(x)/dx$ sean continuas en las dos fronteras entre las regiones $x = -a/2$ y $x = +a/2$, como se requiere para eigenfunciones aceptables (las cuales ya son monovaluadas). Pero no se puede permitir que las cuatro constantes arbitrarias restantes sean especificadas por estas cuatro ecuaciones. Una de ellas deberá permanecer sin especificar, de modo que la amplitud de la eigenfunción pueda ser arbitraria, lo cual se requiere ya que la ecuación diferencial es lineal en la eigenfunción $\psi(x)$. Entonces parece haber una discrepancia entre el número de ecuaciones por satisfacer y el número de constantes que se pueden ajustar, pero esto se resuelve tomando a la energía total como una constante adicional susceptible de ajustar. Posteriormente se verá que este procedimiento funciona sólo para ciertos valores de E . Esto es, surgirá cierto conjunto de valores posibles de la energía total E y así la energía estará *cuantizada* a un conjunto de eigenvalores. La ecuación de Schrödinger tiene soluciones aceptables solamente para estos valores de la energía total.

Como se verá en breve al tratar un caso especial, no es difícil llevar a cabo este procedimiento. Pero el caso general conduce a una solución que contiene una ecuación trascendental complicada (una ecuación en la cual la incógnita está contenida en el argumento de una función tal como una senoide), lo cual impide expresar la solución en una forma matemática concisa. Por lo tanto, se dejarán los detalles de la solución general para el apéndice G y aquí se continuará por el momento con el análisis cualitativo.

Las figuras 6-25 y 6-26 muestran, respectivamente, los eigenvalores y las eigenfunciones para los tres estados ligados de una partícula en un pozo de potencial cuadrado particular. No se

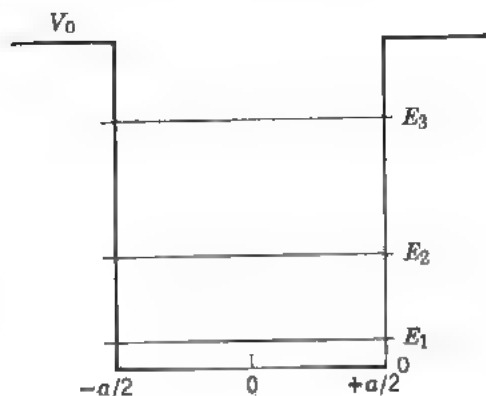
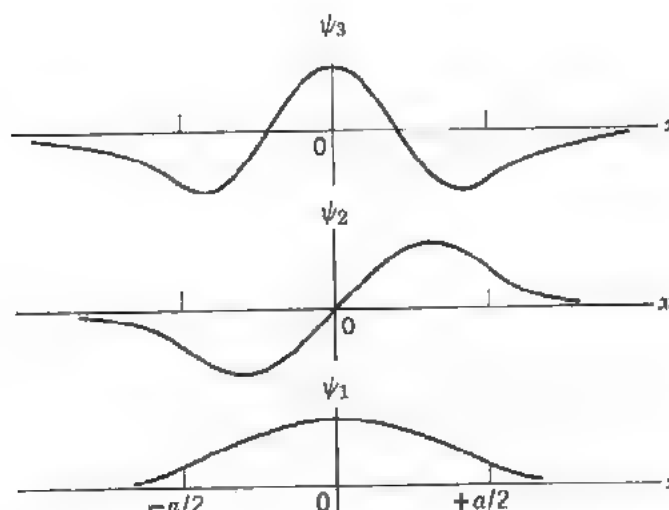


FIGURA 6-25

Pozo cuadrado de potencial y sus tres eigenvalores. No se muestra el continuo de eigenvalores de energía $E > V_0$.

**FIGURA 6-26**

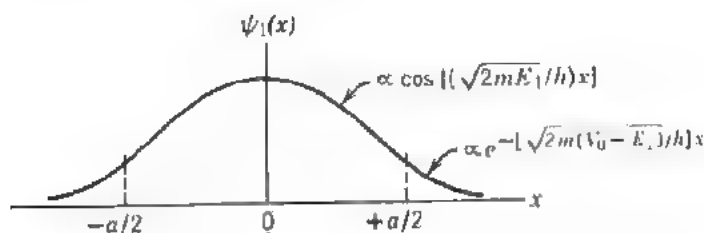
Las tres eigenfunciones ligadas para el pozo de potencial de la figura 6-25.

muestra un continuo de eigenvalores que se extiende desde la cima del pozo hacia arriba ya que está permitido cualquier valor de la energía total E que sea mayor que la altura de las paredes del potencial V_0 , tampoco se muestra el continuo de eigenfunciones. Enfocando primero la atención sobre la región de x dentro del pozo se observa que la curvatura de la parte senoidal de la eigenfunción aumenta conforme aumenta la energía de los eigenvalores correspondientes. En consecuencia a mayor energía de los eigenvalores es mayor el número de oscilaciones de las eigenfunciones correspondientes y mayor su número de onda. Estos resultados reflejan el hecho de que el número de onda k_1 , en la solución de (6-62) para la región interior al pozo, es proporcional a $E^{1/2}$. El pozo cuadrado de potencial descrito en la figura no tiene un cuarto eigenvalor ligado debido a que el valor asociado de k_1 y por lo tanto el de $E^{1/2}$, debería ser muy grande como para satisfacer la condición de ligadura $E < V_0$.

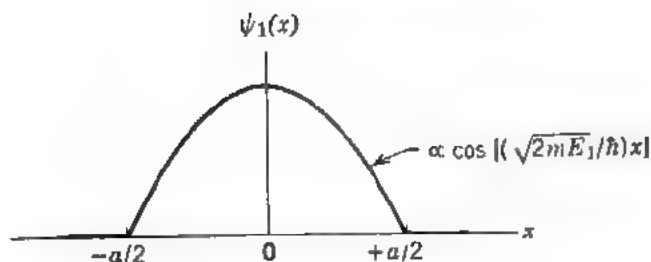
Considérense ahora las partes de las eigenfunciones que se extienden a las regiones exteriores al pozo. En la mecánica clásica nunca sería posible encontrar a una partícula en estas regiones ya que su energía cinética es $p^2/2m = E - V(x)$, que es negativa donde $E < V(x)$.

Obsérvese que las eigenfunciones en estas *regiones clásicamente excluidas* se van a cero más rápidamente conforme menor es la energía de los eigenvalores correspondientes. Esto está de acuerdo con el hecho de que el parámetro exponencial k_{II} , en las soluciones de (6-63) y (6-64) para la región exterior al pozo, es proporcional a $(V_0 - E)^{1/2}$. También está de acuerdo con la idea que constituye la violación más seria de las restricciones clásicas de que la energía total E deberá ser, al menos, tan grande como la energía potencial $V(x)$, las eigenfunciones son más renuentes a penetrar a las regiones clásicamente excluidas.

Resulta instructivo el considerar el efecto que tiene sobre las eigenfunciones el permitir que las paredes del pozo cuadrado se hagan muy altas, es decir, hacer $V_0 \rightarrow \infty$. En la figura 6-27 se

**FIGURA 6-27**

Las primeras eigenfunciones para un pozo cuadrado con paredes de altura moderada.

**FIGURA 6-28**

La primera eigenfunción de un pozo cuadrado con paredes de altura infinita.

muestra la primera eigenfunción para un pozo de potencial cuadrado. Conforme $V_0 \rightarrow \infty$, E_1 aumenta, pero lo hará muy lentamente comparado con el incremento de V_0 . Esto es cierto debido a que E_1 está determinada esencialmente por el requisito de que aproximadamente la mitad de una oscilación de la eigenfunción deberá llenar la longitud del pozo. Por lo tanto el parámetro exponencial $k_{11} = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$, que determina el comportamiento de la eigenfunción en las regiones externas al pozo se hará muy grande conforme V_0 se hace muy grande y que la eigenfunción se irá a cero muy rápidamente en el exterior del pozo. En el límite $\psi_1(x)$ deberá ser cero para toda $x < -a/2$ y para toda $x > +a/2$. Para un pozo cuadrado con paredes infinitamente altas, $\psi_1(x)$ tiene la forma mostrada en la figura 6-28. Es evidente que estos argumentos son válidos para todas las eigenfunciones de este potencial, es decir, para todos los valores de n en un pozo de potencial cuadrado infinito

$$\psi_n(x) = 0 \quad x \leq -a/2 \text{ o } x \geq +a/2 \quad (6-65)$$

Esta condición para las eigenfunciones del pozo cuadrado infinito solamente se pueden satisfacer si se violan en $x = +a/2$ los requisitos de que la derivada $d\psi_n(x)/dx$ de una eigenfunción sea continua en cualquier parte, pero si el estudiante revisa los argumentos que se presentaron para justificar el requisito, encontrará que la derivada sólo será continua cuando el potencial sea finito.

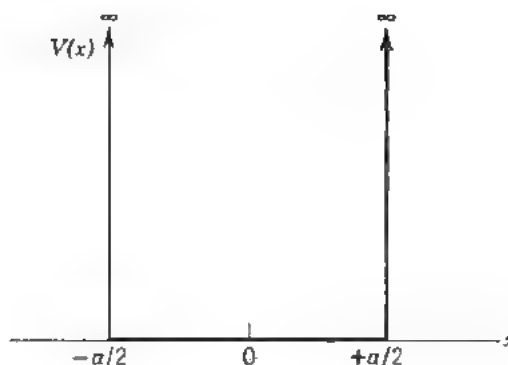
6.8 El potencial de pozo cuadrado infinito

El potencial de pozo cuadrado infinito se escribe como

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < -a/2 \text{ o } x > +a/2 \\ 0 & -a/2 < x < +a/2 \end{cases} \quad (6-66)$$

y se muestra en la figura 6-29. Tiene la característica de ligar una partícula con cualquier energía total finita $E \geq 0$. En la mecánica clásica cualesquiera de estas energías son posibles, pero en la mecánica cuántica sólo son permitidos ciertos eigenvalores discretos E_n .

Se verá que es muy fácil encontrar expresiones simples y concisas para los eigenvalores y eigenfunciones de este potencial, debido a que la ecuación trascendente que aparece en la solución de su ecuación de Schrödinger independiente del tiempo tiene soluciones simples. Para valores del número cuántico n que no sean muy grandes, es posible utilizar estos eigenvalores y eigenfunciones como eigenvalores y eigenfunciones aproximadas de un pozo de potencial cuadrado con V_0 grande, pero finita. Por ejemplo, con anterioridad se mencionó que es una muy buena aproximación tomar un pozo cuadrado finito como el potencial para un electrón de conducción en un bloque de metal. En el ejemplo 6-2 se mostró que para el Cu metálico las eigenfunciones penetran una distancia de aproximadamente 10^{-10} m en las

**FIGURA 6-29**

Pozo de potencial cuadrado infinito.

regiones clásicamente excluidas externas al pozo. Esta distancia es muy pequeña comparada con el ancho del pozo cuadrado, que es el ancho del bloque de Cu , que para muchos propósitos es una aproximación igualmente buena utilizar las eigenfunciones y eigenvalores correspondientes para un pozo cuadrado infinito. También se utilizarán pozos cuadrados de potencial infinito para estudiar las propiedades mecánico-cuánticas de un sistema de moléculas en un gas y otras partículas que se encuentran estrictamente confinadas en una caja de ciertas dimensiones. A una partícula que se mueve bajo la influencia de un potencial de pozo cuadrado infinito se le denomina con frecuencia *partícula en una caja*.

La *solución general* a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para la región interna de un pozo cuadrado infinito se puede escribir como la onda estacionaria (6-62), la cual se puede simplificar, eliminando las primas, a

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx \quad \text{donde } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad -a/2 \leq x \leq +a/2 \quad (6-67)$$

(Los estudiantes que se hayan saltado las secciones anteriores podrán ver que esta $\psi(x)$ representa una onda estacionaria, si observan que la función de onda asociada $\Psi(x,t) = \psi(x) e^{-iEt/\hbar}$ tiene nodos fijos y podrán verificar que la $\psi(x)$ es realmente una solución a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo substituyéndola en (6-2). De acuerdo con la condición de (6-65), $\psi(x)$ tiene el valor cero en las regiones exteriores al pozo. Por supuesto que esto deberá ser cierto de modo que la densidad de probabilidad sea cero en estas regiones, ya que la partícula se encuentra estrictamente confinada dentro del pozo por sus paredes de potencial infinitamente altas. En particular, en las fronteras del pozo

$$\psi(x) = 0 \quad x = \pm a/2 \quad (6-68)$$

Esto es, la onda estacionaria tiene nodos en las paredes de la caja.

Ahora se desarrollarán las relaciones a satisfacer por las constantes arbitrarias A y B y por el parámetro k . Aplicando las condiciones en la frontera (6-68) para $x = +a/2$ se obtiene

$$A \sin \frac{ka}{2} + B \cos \frac{ka}{2} = 0 \quad (6-69)$$

en $x = -a/2$, (6-68) produce

$$A \sin \left(-\frac{ka}{2} \right) + B \cos \left(-\frac{ka}{2} \right) = 0$$

o

$$-A \sin \frac{ka}{2} + B \cos \frac{ka}{2} = 0 \quad (6-70)$$

Sumando las dos últimas ecuaciones numeradas se tiene

$$2B \cos \frac{ka}{2} = 0 \quad (6-71)$$

Y restándolas

$$2A \sin \frac{ka}{2} = 0 \quad (6-72)$$

Tanto (6-71) como (6-72) deberán satisfacerse. Cuando esto se hace, $\psi(x)$ y $d\psi(x)/dx$ serán finitas en cualquier parte y monovaluadas y $\psi(x)$ será continua en cualquier parte. Como se discutió al final de sección anterior, $d\psi(x)/dx$ será discontinua en $x = \pm a/2$.

No existe valor del parámetro k para el cual, tanto $\cos(ka/2)$ como $\sin(ka/2)$ sean cero simultáneamente y ciertamente no es deseable satisfacer estas dos ecuaciones haciendo A y B iguales a cero ya que entonces $\psi(x) = 0$ en todas partes y la eigenfunción no tendría interés porque la partícula asociada ¡no estaría en la caja! Sin embargo, estas ecuaciones se pueden satisfacer ya sea escogiendo k de modo que $\cos(ka/2)$ sea cero y poniendo A igual a cero, o escogiendo k de modo que $\sin(ka/2)$ sea cero y haciendo B igual a cero. Esto es, tomando cualesquiera

$$A = 0 \quad \text{y} \quad \cos \frac{ka}{2} = 0 \quad (6-73)$$

o

$$B = 0 \quad \text{y} \quad \sin \frac{ka}{2} = 0 \quad (6-74)$$

Entonces existen dos clases de soluciones.

Para la primera clase

$$\psi(x) = B \cos kx \quad \text{donde} \quad \cos \frac{ka}{2} = 0 \quad (6-75)$$

Para la segunda clase

$$\psi(x) = A \sin kx \quad \text{donde} \quad \sin \frac{ka}{2} = 0 \quad (6-76)$$

Las condiciones sobre el número de onda k expresadas en (6-75) y (6-76), están en la forma de ecuaciones trascendentes ya que la incógnita k aparece en los argumentos de las senoides; pero ocurre que estas ecuaciones trascendentes son tan simples que sus soluciones se pueden escribir de inmediato en forma concisa. Los valores de k permitidos para la primera clase, (6-75), son

$$\frac{ka}{2} = \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}, \frac{5\pi}{2}, \dots$$

ya que $\cos(\pi/2) = \cos(3\pi/2) = \cos(5\pi/2) = \dots = 0$. Es conveniente expresar esto como

$$k_n = \frac{n\pi}{a} \quad n = 1, 3, 5, \dots \quad (6-77)$$

Los valores permitidos de k para la segunda clase, (6-76), son

$$\frac{ka}{2} = \pi, 2\pi, 3\pi, \dots$$

ya que $\sin \pi = \sin 2\pi = \sin 3\pi = \dots = 0$. Lo cual también se puede

$$k_n = \frac{n\pi}{a} \quad n = 2, 4, 6, \dots \quad (6-78)$$

Conociendo los valores permitidos de k se pueden obtener las soluciones a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el pozo cuadrado infinito a partir de (6-75) y (6-76). Encontrándose

$$\psi_n(x) = B_n \cos k_n x \quad \text{donde } k_n = \frac{n\pi}{a} \quad n = 1, 3, 5, \dots \quad (6-79)$$

y

$$\psi_n(x) = A_n \sin k_n x \quad \text{donde } k_n = \frac{n\pi}{a} \quad n = 2, 4, 6, \dots \quad (6-80)$$

La solución correspondiente a $n = 0$ es $\psi_0(x) = A \sin 0 = 0$; la cual se excluye ya que no describe a una partícula en una caja. Se ha utilizado al número cuántico n para denotar las diferentes soluciones de las ecuaciones trascendentes y las eigenfunciones correspondientes. Si fuera necesario aplicar la condición de normalización, se podrían determinar las constantes A_n y B_n que especifican las amplitudes de las eigenfunciones (véase ejemplo 5-10), pero usualmente no es necesario el hacerlo.

El número cuántico n también se utiliza para denotar los eigenvalores correspondientes. Utilizando la relación $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ de (6-67) y la expresión $k_n = n\pi/a$ en (6-79) y (6-80) para los valores permitidos de k , se encuentra

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2} \quad n = 1, 2, 3, 4, 5, \dots \quad (6-81)$$

De lo cual se concluye que sólo son permitidos ciertos valores de la energía total E . La energía total de la partícula en la caja está *cuantizada*.

El tratamiento cuantitativo del pozo cuadrado finito estudiado en la sección anterior y desarrollado en el apéndice G es esencialmente el mismo que se ha seguido. Pero la penetración de la eigenfunción en las regiones exteriores al pozo, que varían con la energía del eigenvalor asociado, conducen a ecuaciones trascendentes para k más complicadas que las que se pueden resolver gráfica o numéricamente.

La figura 6-30 ilustra el pozo cuadrado de potencial infinito y sus primeros eigenvalores especificados por (6-81). Por supuesto que todos los eigenvalores están separados dis-

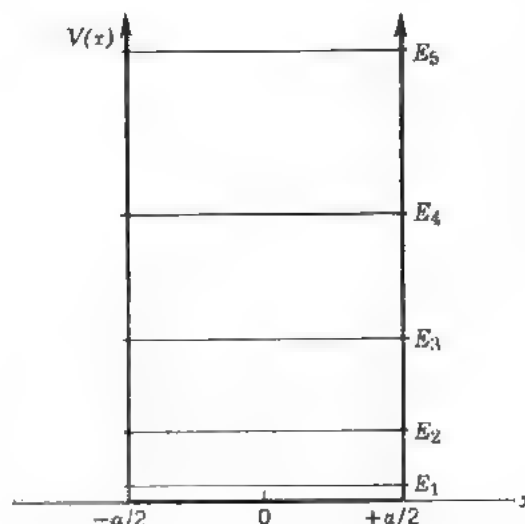


FIGURA 6-30

Los primeros eigenvalores de un pozo de potencial cuadrado infinito.

cretamente para un pozo de potencial infinito ya que la partícula está ligada para cualquier eigenvalor finito. Obsérvese que el patrón formado por los primeros tres eigenvalores del pozo cuadrado infinito es muy similar al formado por los tres eigenvalores ligados del pozo cuadrado finito mostrado en la figura 6-25. A este respecto, los resultados del pozo cuadrado infinito constituyen una aproximación a los resultados del pozo cuadrado finito. Sin embargo, en detalle cada función energía-potencial $V(x)$ tiene su propio conjunto característico de eigenvalores ligados E_n .

La energía del primer eigenvalor es particularmente interesante. Para el pozo cuadrado infinito es

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad (6-82)$$

Que se llama la *energía del punto cero* y es la energía total más baja posible que puede tener la partícula si está ligada a la región $-a/2 \leq x \leq +a/2$ por el potencial del pozo cuadrado infinito. *La partícula no puede tener energía total cero.* El fenómeno es básicamente un resultado del principio de incertidumbre. Para ver esto considérese el hecho de que si la partícula está ligada por el potencial, entonces se conoce su coordenada x dentro de una incertidumbre de aproximadamente $\Delta x \simeq a$. En consecuencia, la incertidumbre en su impulso deberá ser al menos $\Delta p \simeq \hbar/2\Delta x \simeq \hbar/2a$. El principio de incertidumbre no puede permitir que la partícula esté ligada por el potencial con energía total cero ya que esto significaría que la incertidumbre en el impulso debería ser igual a cero.

Para el caso particular del eigenvalor E_1 , la magnitud del impulso es $p_1 \simeq \sqrt{2mE_1} = \pi\hbar/a$. Puesto que la partícula está en un estado de movimiento descrito por una eigenfunción de onda estacionaria, se puede mover en cualquier dirección y el valor real del impulso es incierto por una cantidad que es aproximadamente $\Delta p \simeq 2p_1 \simeq 2\pi\hbar/a$. La incertidumbre producto $\Delta x \Delta p \simeq a2\pi\hbar/a \sim 2\pi\hbar$ se ajusta muy bien con el límite inferior establecido por el principio de incertidumbre. (Compárese con el cálculo cuidadoso del ejemplo 5-10).

Se concluye que debe existir una energía del punto cero ya que debe existir un *movimiento del punto cero*. Esto está en franco contraste con la idea de la física clásica, de que todo movimiento cesa cuando un sistema tiene su energía mínima a la temperatura del cero absoluto. La energía del punto cero es responsable de muchos fenómenos cuánticos interesantes que se observan con el comportamiento de la materia a temperaturas muy bajas. Un ejemplo muy notorio es el hecho de que el helio no solidifica aún a la temperatura más baja alcanzable ($\sim 0.001^\circ\text{K}$) a menos que se aplique una presión alta.

En la figura 6-31 se muestran las primeras eigenfunciones del pozo potencial cuadrado infinito. Obsérvese que el número de mitades de longitudes de onda de cada eigenfunción es igual a su número cuántico n y por lo tanto el número de nodos es $n + 1$. Al comparar estas

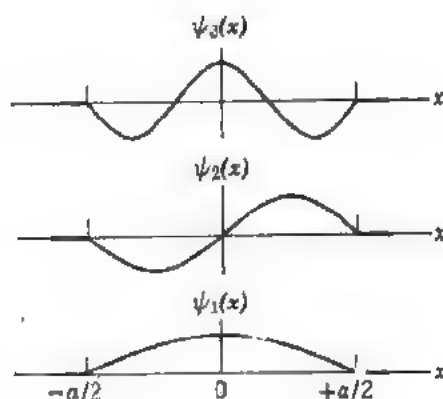


FIGURA 6-31

Primeras eigenfunciones para un pozo de potencial cuadrado infinito.

eigenfunciones con las correspondientes del pozo cuadrado finito mostradas en la figura 6-26, el estudiante puede ver nuevamente cómo los resultados que se obtienen para el potencial simple se pueden utilizar para aproximar a aquellos de potenciales más complicados (en forma más precisa, para eigenfunciones de n más baja).

El lector familiarizado con instrumentos musicales de cuerda podrá observar que las eigenfunciones para una partícula confinada estrictamente entre dos puntos en los extremos de la caja, se parecen a las funciones que describen las formas posibles que asumen las cuerdas vibrantes cuando tienen sus dos extremos fijos. La razón es que ambos sistemas están sujetos de forma análoga a ecuaciones diferenciales independientes del tiempo y que satisfacen condiciones análogas en los dos puntos. Aquí está otro ejemplo de la relación entre la mecánica cuántica y el movimiento ondulatorio clásico. Los estudiantes con inclinaciones musicales también podrán observar que las frecuencias $\nu_n = E_n/h$ del factor independiente del tiempo en las funciones de onda para la partícula confinada, satisfacen la relación $\nu_n \propto n^2$ (ya que $E_n = \pi^2 \hbar^2 n^2 / 2ma^2$), mientras que las frecuencias de la cuerda vibrante satisfacen la "progresión armónica" $\nu_n \propto n$. Esta diferencia proviene de que los dos sistemas obedecen ecuaciones diferenciales dependientes del tiempo que no son del todo análogas.

Ejemplo 6-5. Derivar la ley de cuantización de la energía para el pozo cuadrado infinito, (6-81), directamente de la relación de de Broglie $p = h/\lambda$ metiendo un número entero de mitades de longitudes de onda de de Broglie $\lambda/2$ en el ancho a del pozo.

De la figura 6-31 es evidente que las eigenfunciones del pozo cuadrado infinito satisfacen la relación siguiente entre las longitudes de onda de de Broglie y la longitud del pozo

$$n \frac{\lambda}{2} = a \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Esto es, en el pozo entran un número entero de mitades de longitud de onda, lo cual significa

$$\lambda = \frac{2a}{n} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Así que según de Broglie, los valores correspondientes al impulso de la partícula son

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{hn}{2a} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Como la energía potencial de la partícula es cero dentro del pozo, su energía total es igual a su energía cinética. Entonces

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 n^2}{2ma^2} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

que concuerda con (6-81). Este cálculo trivial solamente se puede usar para el caso más simple de una partícula ligada, es decir el caso de un pozo de potencial cuadrado infinito, y no se puede aplicar para encontrar los eigenvalores o eigenfunciones de un potencial más complicado tal como el de un pozo cuadrado finito. (Véase también el análisis, en conexión con (4-25), de la aplicación de la regla de cuantización de Wilson-Sommerfeld para el pozo cuadrado infinito). ◀

Ejemplo 6-6. Antes del descubrimiento del neutrón se pensaba que un núcleo de número atómico Z y peso atómico A estaba compuesto de A protones y $(A-Z)$ electrones, pero existía un problema serio con la magnitud de la energía del punto cero para una partícula tan ligera como un electrón confinada a una región tan pequeña como un núcleo. Estimar la energía del punto cero E .

Poniendo la masa del electrón m igual a 10^{-30} kg y el ancho del pozo igual a 10^{-14} m (dimensiones nucleares típicas), se obtiene de (6-82)

$$\begin{aligned} E &= \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \simeq \frac{10 \times 10^{-68} \text{ joule}^2 \cdot \text{seg}^2}{2 \times 10^{-30} \text{ kg} \times 10^{-28} \text{ m}^2} \simeq \frac{10^{-9}}{2} \text{ joule} \\ &\simeq \frac{10^{-9} \text{ joule}}{2} \times \frac{1 \text{ eV}}{1.6 \times 10^{-19} \text{ joule}} \simeq 3 \times 10^8 \text{ eV} \\ &= 3000 \text{ MeV} \end{aligned}$$

Para estimar la energía del punto cero está plenamente justificado el tratar al electrón como si estuviera confinado a un pozo cuadrado infinito. También está justificado ignorar el carácter tridimensional del sistema real. Pero no estaría justificado el tomar el valor de E que se ha obtenido, ya que es extremadamente grande comparado con la energía de la masa en reposo del electrón $m_0 c^2 \simeq 0.5 \text{ MeV}$. En este problema en particular, deberá usarse un análogo de (6-82) válido desde el punto de vista relativista.

La fórmula requerida se puede obtener partiendo de la técnica utilizada en el ejemplo 6-5. Tanto la ecuación $\lambda = 2a/n$ como $p = \hbar/\lambda$ mantienen su validez en el extremo del rango relativista. Así, si se substituye $E = p^2/2m$ por $E = cp$ (la relación $E^2 = c^2 p^2 + m_0^2 c^4$ energía impulso en el límite $E \gg m_0 c^2$), se obtiene para $n = 1$

$$\begin{aligned} E = cp &= \frac{ch}{\lambda} = \frac{chn}{2a} = \frac{\pi \hbar n}{a} \simeq \frac{3 \times 3 \times 10^8 \text{ m/seg} \times 10^{-34} \text{ joule} \cdot \text{seg}}{10^{-14} \text{ m}} \\ &\times \frac{1 \text{ eV}}{1.6 \times 10^{-19} \text{ joule}} \simeq 6 \times 10^7 \text{ eV} = 60 \text{ MeV} \end{aligned}$$

Un electrón *podría* estar ligado con esta energía del punto cero en un núcleo, si la magnitud de la profundidad del pozo de potencial fuera mayor que la magnitud de la energía del punto cero. Hay un potencial de ligadura que actúa sobre el electrón debido a la atracción de Coulomb de la carga positiva del núcleo, pero la magnitud de potencial no es lo suficientemente grande. Esta magnitud se puede estimar tomando $r = 10^{-14}$ m, y $Q_1 = Ae$, $Q_2 = -e$ en la fórmula para el potencial de Coulomb donde e es la magnitud de la carga del electrón. Para un valor típico de $A = 100$, se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{Q_1 Q_2}{4\pi\epsilon_0 r} &= -\frac{Ae^2}{4\pi\epsilon_0 r} \simeq -\frac{10^2 \times (1.6 \times 10^{-19} \text{ coul})^2}{10^{-10} \text{ coul}^2/\text{nt} \cdot \text{m}^2 \times 10^{-14} \text{ m}} \times \frac{1 \text{ eV}}{1.6 \times 10^{-19} \text{ joule}} \\ &\simeq -1.6 \times 10^7 \text{ eV} = -16 \text{ MeV} \end{aligned}$$

La cual es diez veces mas pequeña que la energía de enlace requerida. De modo que un electrón no puede estar ligado en un núcleo debido a la energía del punto cero requerida por el principio de incertidumbre.

En 1932 Chadwick motivado por una sugerencia de Rutherford descubrió el neutrón. Ahora se sabe que un núcleo está compuesto por Z protones y $(A-Z)$ neutrones. Debido a que los neutrones, como los protones, son partículas pesadas, su energía del punto cero en un núcleo es relativamente baja como para que puedan ligarse sin dificultad. En efecto, como se verá en el capítulo 15, algunas de las propiedades más importantes de los núcleos se pueden explicar en términos de los estados cuánticos de los neutrones y protones que se mueven en un pozo cuadrado de potencial (finito). ◀

La figura 6-31 pone de relieve la diferencia esencial entre las dos clases de eigenfunciones de onda estacionaria especificadas por (6-79) y (6-80). Las eigenfunciones de la primera clase $\psi_1(x)$, $\psi_3(x)$, $\psi_5(x)$, . . . son *funciones pares* de x ; esto es

$$\psi(-x) = +\psi(x) \quad (6-83)$$

En la mecánica cuántica se dice que estas funciones tienen *paridad par*. Las eigenfunciones de segunda clase $\psi_2(x)$, $\psi_4(x)$, $\psi_6(x)$, . . . , son *funciones impares* de x ; esto es

$$\psi(-x) = -\psi(x) \quad (6-84)$$

y se dice que tienen *paridad impar*.

Las eigenfunciones tienen una *paridad definida*, ya sea par o impar, ya que el origen del eje x se ha escogido de modo que el potencial de pozo cuadrado *simétrico* $V(x)$ sea una función *par* de x . Obsérvese que si se vuelve a definir el origen del eje x , en la figura 6-31 por ejemplo situándolo en el punto $x = -a/2$, las eigenfunciones ya no tendrán una paridad definida.

Estos resultados se obtienen para el potencial de pozo cuadrado y para cualesquiera otros potenciales simétricos, ya que las cantidades mensurables que describen el movimiento de una partícula en estados *ligados* de estos potenciales también deberán ser simétricos alrededor del punto de simetría del potencial. Si se escoge el origen del eje x en el punto de simetría, entonces la función que describe la cantidad mensurable deberá ser una función *par*. Por ejemplo, esto es cierto para la función densidad de probabilidad $P(x,t)$, tanto para las eigenfunciones con paridad par como para las de paridad impar, ya que

$$P(-x,t) = \psi^*(-x)\psi(-x) = [\pm\psi^*(x)][\pm\psi(x)] = \psi^*(x)\psi(x) = P(x,t) \quad (6-85)$$

Esto no es cierto para la función de onda misma en el caso de una eigenfunción con paridad impar; esa función de onda es una función *impar* de x , pero esto no es una contradicción ya que la función de onda misma no es mensurable. Las eigenfunciones para estados *no ligados* de potenciales que son funciones pares de x no tienen necesariamente paridades definidas ya que ellas no describen necesariamente movimientos simétricos de las partículas.

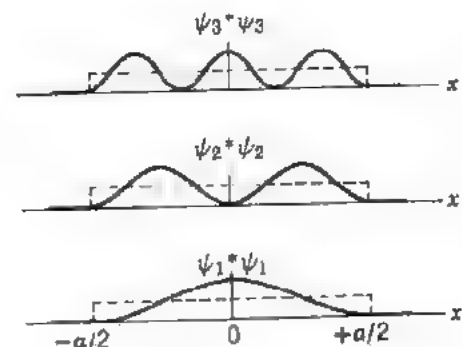
En una dimensión, el hecho de que eigenfunciones de onda estacionaria tengan paridades definidas, si $V(-x) = V(x)$, es de gran importancia ya que esto simplifica ciertos cálculos. En tres dimensiones, la propiedad tiene un significado más profundo como se verá en el capítulo 8 en conexión con la emisión de radiación por un átomo que realiza una transición de un estado excitado a su estado base.

Las funciones de densidad de probabilidad correspondientes a las primeras eigenfunciones del pozo cuadrado infinito están esquematizadas en la figura 6-32, en la cual también se ilustra la densidad de probabilidad que predeciría la mecánica clásica para una partícula que rebota hacia adelante y hacia atrás entre $-a/2$ y $+a/2$. Puesto que la partícula clásica invertiría una cantidad de tiempo igual en cualquier elemento del eje x en esta región, sería igualmente probable encontrarla en cualesquiera de estos elementos. La densidad de probabilidad en la mecánica cuántica oscila más y más conforme n crece. En el límite en el que n tiende a infinito, esto es para eigenvalores de muy alta energía, las oscilaciones están tan comprimidas que no hay experimento que pueda tener la resolución para observar otra cosa que el comportamiento promedio de la densidad de probabilidad predicha por la mecánica cuántica.

Además, la separación fraccionaria de los eigenvalores se aproxima a cero conforme n se aproxima a infinito, de modo que en el límite no es posible resolver su discrecicidad. Por lo tanto se ve que las predicciones de la mecánica cuántica se aproximan a las predicciones de la mecánica clásica en el límite de números cuánticos grandes o alta energía; lo cual era de esperarse del principio de correspondencia de la teoría cuántica antigua.

FIGURA 6-32

Las primeras funciones de densidad de probabilidad para un pozo de potencial cuadrado infinito. Las curvas punteadas son las predicciones de la mecánica clásica.



6.9 El potencial de oscilador armónico simple

Se han estudiado varios potenciales que son funciones discontinuas de la posición con valores constantes en las regiones adyacentes. Ahora se regresará al caso más realista de potenciales que son funciones continuas de la posición. Resulta que sólo existen un número limitado de estos potenciales para los cuales es posible obtener soluciones a la ecuación de Schrödinger por técnicas analíticas. Pero, afortunadamente, estos potenciales incluyen algunos de los casos más importantes, tales como el potencial de Coulomb, $V(r) \propto r^{-1}$, que se analizará en el capítulo siguiente y el potencial de oscilador armónico simple $V(x) \propto x^2$ que se analizará en esta sección. A este respecto le recordamos al lector que las soluciones a las ecuaciones de Schrödinger para potenciales de *cualquier* forma siempre se pueden obtener mediante las técnicas numéricas desarrolladas en el apéndice F).

Debido a que el oscilador armónico simple es el prototipo para cualquier sistema oscilatorio, es de tremenda importancia en la física y en todos los campos basados en la física. Por ejemplo, se le utiliza en el estudio de vibraciones de átomos en moléculas diatómicas, las propiedades acústicas y térmicas de sólidos que provienen de vibraciones atómicas, propiedades magnéticas de sólidos, lo cual incluye vibraciones en la orientación del núcleo y la electrodinámica de sistemas cuánticos en los cuales las ondas electromagnéticas están vibrando. Dicho en general, el oscilador armónico simple se puede utilizar para describir casi cualquier sistema en el cual una entidad ejecute *vibraciones pequeñas* alrededor de un punto de *equilibrio estable*.

En una posición de equilibrio estable la función potencial $V(x)$ deberá tener un mínimo. Puesto que cualquier función potencial realista es continua, la función en la región cercana al mínimo casi siempre se puede aproximar por una parábola tal como se ilustra en la figura 6-33. Pero para vibraciones *pequeñas* lo único que cuenta es que $V(x)$ está próxima a su mínimo. Si se escogen los orígenes del eje x y del eje de la energía en el mínimo la ecuación para esta función potencial parabólica se puede escribir como

$$V(x) = \frac{C}{2} x^2 \quad (6-86)$$

donde C es una constante. En la figura 6-34 se muestra este potencial. Una partícula que se mueve bajo su influencia experimenta una fuerza restauradora lineal (o ley de Hooke) $F(x) = -dV(x)/dx = -Cx$, donde C es la constante de fuerza.

La mecánica clásica predice que una partícula bajo la influencia de la fuerza restauradora lineal ejercida por el potencial (6-86) y desplazada una cantidad x_0 de la posición de equilibrio, oscilará en un movimiento armónico simple alrededor de la posición de equilibrio con frecuencia

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{C}{m}} \quad (6-87)$$

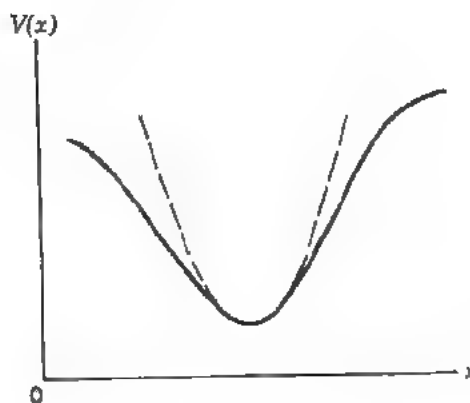
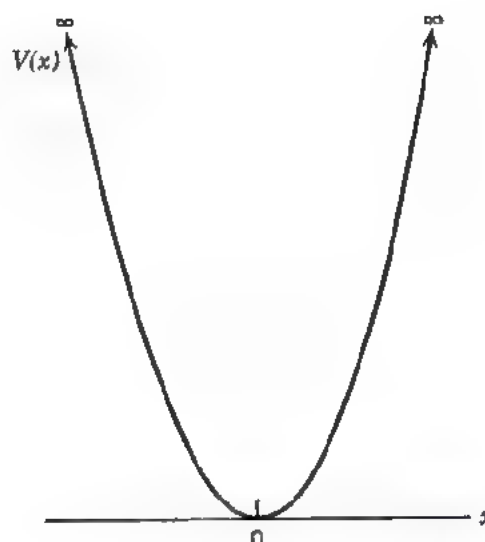


FIGURA 6-33

Ilustración del hecho de que cualquier potencial continuo con un mínimo (curva continua) se puede aproximar en las cercanías del mínimo por un potencial parabólico (curva punteada).

**FIGURA 6-34**

Potencial de oscilador armónico simple.

donde m es su masa. Según esta teoría, la energía total E de la partícula es proporcional a x_0^2 , y puede tener *cualquier* valor ya que x_0 es arbitraria.

La mecánica cuántica predice que la energía total E puede tomar *solamente* un conjunto discreto de valores ya que la partícula está ligada por el potencial a una región de extensión finita, resultado que era conocido aún en la teoría cuántica antigua. El lector recordará que el postulado de Planck predice que la energía de una partícula que ejecuta oscilaciones armónicas simples solamente puede tomar uno de los valores

$$E_n = nh\nu \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (6-88)$$

¿Cuáles son los valores de la energía permitidos que predice la mecánica cuántica de Schrödinger para este potencial tan importante? Para responderlo, se deberá resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el potencial de oscilador armónico simple.

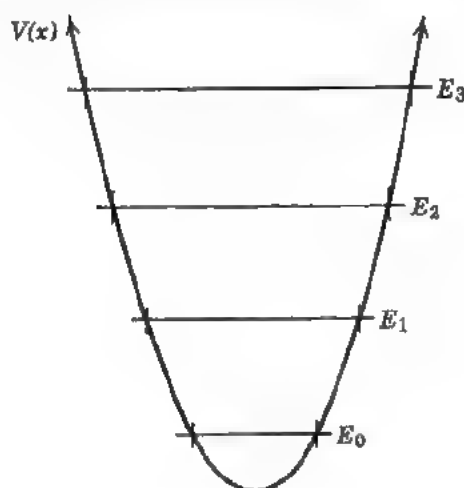
Las matemáticas utilizadas en la solución analítica de la ecuación no son difíciles y si muy interesantes; pero ya que la solución es muy larga se han reservado para el apéndice H. En vez de verificar por substitución una eigenfunción típica y obtener un eigenvalor de la solución, nos concentraremos en describir los resultados de la solución y analizar su significado físico.

Se encuentra que los eigenvalores para el potencial de oscilador armónico simple están dados por la fórmula

$$E_n = (n + 1/2)h\nu \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (6-89)$$

donde ν es la frecuencia de oscilación clásica de la partícula en el potencial. Todos los eigenvalores son discretos ya que para cualquiera de ellos la partícula está ligada. En la figura 6-35 se muestran el potencial y los eigenvalores.

Si se comparan los resultados de Schrödinger con el postulado de Planck se ve que en la mecánica cuántica todos los eigenvalores están corridos por una cantidad $h\nu/2$. Como una consecuencia la energía total mínima posible para una partícula ligada al potencial es $E_0 = h\nu/2$ que es la energía del punto cero para el potencial y cuya existencia es requerida por el principio de incertidumbre. Por lo tanto, la cuantización de la energía del oscilador armónico simple según Planck está equivocada por la constante aditiva $h\nu/2$. Esta constante se cancela en la mayoría de las aplicaciones del postulado de Planck ya que en ellas sólo se utilizan diferencias entre dos valores de la energía. Como ejemplo considere la radiación electromagnética emitida por la vibración de la distribución de carga de una molécula diatómica cuyo espacio interatómico ejecuta oscilaciones armónicas simples. Como las frecuencias de los

**FIGURA 6-35**

Primeros eigenvalores del potencial de oscilador armónico simple. Observa que las regiones clásicamente permitidas (entre las intersecciones de $V(x)$ y E_n) se expanden conforme crecen los valores de E_n .

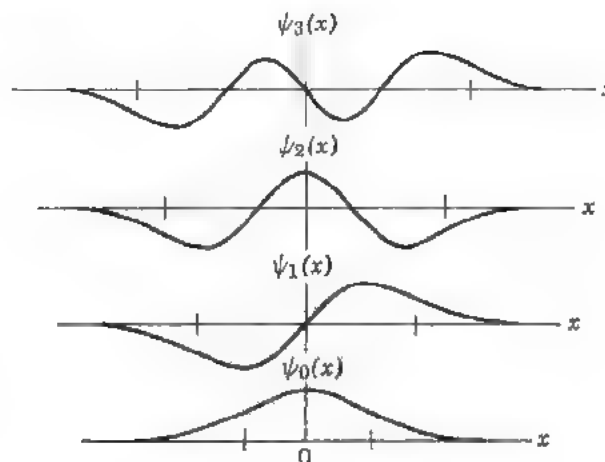
Los fotones emitidos sólo dependen de las diferencias en las energías permitidas de la molécula, la constante aditiva no tiene efecto sobre las *frecuencias* de los fotones.

Sin embargo, existen cantidades observables que muestran que el postulado de Planck está equivocado ya que no contiene la energía del punto cero. El ejemplo más importante también está conectado con la emisión de radiación por una molécula o átomo vibrante. Cuando se estudie este material en un capítulo posterior, se verá que la rapidez de *emisión* de los fotones no concuerda con los experimentos a menos que los osciladores armónicos simples tengan energía del punto cero. De hecho, se encontrará que la única razón por la que la molécula emite *cualquier* radiación es que sus vibraciones han sido estimuladas por un campo electromagnético circundante cuya intensidad de campo realiza oscilaciones armónicas simples debido a la energía del punto cero del campo.

Además de proporcionar eigenvalores totalmente correctos, la mecánica cuántica también proporciona las eigenfunciones para el oscilador armónico simple. Las eigenfunciones ψ_n que corresponden a los primeros eigenvalores E_n se enlistan en la tabla 6-1 y se grafican en la figura 6-36. Las eigenfunciones están expresadas en términos de la variable adimensional $u = [(Cm)^{1/4}/\hbar^{1/2}]x$, que sólo difiere de x por una constante de proporcionalidad que depende de las propiedades del oscilador. Para todos los valores de x , la eigenfunción está dada por el producto de una exponencial, cuyo exponente es proporcional a $-x^2$, por un polinomio simple de orden x^n . El polinomio es el causante del comportamiento oscilatorio de ψ_n en la región clásicamente permitida en la que $E_n < V(x)$. El número de oscilaciones aumenta conforme aumenta n ya que existen n valores de x para los cuales un polinomio de orden x^n tiene el valor cero. Estos valores de x son la localización de los nodos de ψ_n . Las regiones clásicamente

TABLA 6-1. Algunas eigenfunciones $\psi(u)$ para el potencial de oscilador armónico simple donde u está relacionada con la coordenada x por la ecuación $u = [(Cm)^{1/4}/\hbar^{1/2}]x$

Número cuántico	Eigenfunciones
0	$\psi_0 = A_0 e^{-u^2/2}$
1	$\psi_1 = A_1 u e^{-u^2/2}$
2	$\psi_2 = A_2 (1 - 2u^2) e^{-u^2/2}$
3	$\psi_3 = A_3 (3u - 2u^3) e^{-u^2/2}$
4	$\psi_4 = A_4 (3 - 12u^2 + 4u^4) e^{-u^2/2}$
5	$\psi_5 = A_5 (15u - 20u^3 + 4u^5) e^{-u^2/2}$

**FIGURA 6-36**

Primeras eigenfunciones del potencial de oscilador armónico simple. Las marcas verticales sobre el eje x indican los límites del movimiento clásico mostrados en la figura 6-35.

permitidas se encuentran en el interior de las marcas verticales mostradas en la figura 6-36. Estas regiones se hacen más anchas al crecer n debido a la forma del potencial de oscilador armónico simple $V(x)$, como puede verse analizando la figura 6-35 donde también se indican las regiones clásicamente permitidas para cada E_n . Fuera de estas regiones las eigenfunciones decrecen muy rápidamente debido a que su comportamiento se ve dominado por la exponencial decreciente. Puesto que el potencial satisface la relación $V(-x) = V(x)$ se espera que sus eigenfunciones tengan paridades definidas. Una inspección a la tabla 6-1 muestra que esto es cierto y que la paridad es par para n par e impar para n impar. Entonces, la eigenfunción para la energía permitida más baja es de paridad par como en el caso de un pozo de potencial cuadrado. Las constantes multiplicativas A_n determinan las amplitudes de las eigenfunciones. Si fuera necesario, se puede utilizar el procedimiento de normalización para fijar sus valores, como en el ejemplo (5-7) pero usualmente no es necesario.

Las eigenfunciones de oscilador armónico simple contienen una gran cantidad de información acerca del comportamiento del sistema, parte de la cual se obtuvo en el capítulo 5. Por ejemplo, las figuras 5-3 y 5-18 dieron una representación cuidadosa de las funciones de densidad de probabilidad para los estados cuánticos del oscilador $n = 1$ y $n = 13$. En el capítulo 8 se mostrará cómo se pueden utilizar las eigenfunciones para calcular las velocidades de emisión de radiación de un oscilador armónico simple cargado y derivar la regla de selección $n_i - n_f = \pm 1$ que hubo de introducirse en la teoría cuántica antigua mediante argumentos basados en el casi increíble principio de correspondencia.

Ejemplo 6-7. Debido a que las eigenfunciones de oscilador armónico simple para n pequeñas tienen formas matemáticas simples no es muy difícil verificar por sustitución directa que satisfacen la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el potencial (6-86) y para los eigenvalores de (6-89). Hacer esta verificación para $n = 1$. (Para $n = 0$ la función de onda se verificó por sustitución directa en la ecuación de Schrödinger.

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{C}{2} x^2 \psi = E\psi$$

Para verificar que el eigenvalor

$$E_1 = \frac{3}{2} \hbar \omega = \frac{3}{2} \frac{h}{2\pi} \left(\frac{C}{m} \right)^{1/2} = \frac{3}{2} \hbar \left(\frac{C}{m} \right)^{1/2}$$

y la eigenfunción

$$\psi_1 = A_1 u e^{-u^2/2}$$

$$\text{donde } u = \frac{(Cm)^{1/4}}{\hbar^{1/2}} x$$

satisfacen la ecuación, se evalúan las derivadas

$$\begin{aligned}\frac{d\psi_1}{dx} &= \frac{du}{dx} \frac{d\psi}{du} = \frac{(Cm)^{1/4}}{\hbar^{1/2}} [A_1 e^{-u^2/2} + A_1 u(-u)e^{-u^2/2}] \\ &\quad - \frac{(Cm)^{1/4}}{\hbar^{1/2}} A_1 e^{-u^2/2} [1 - u^2]\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{d^2\psi_1}{dx^2} &= \frac{du}{dx} \frac{d}{du} \frac{d\psi_1}{du} = \frac{(Cm)^{1/4}}{\hbar^{1/2}} \left\{ \frac{d}{du} \frac{(Cm)^{1/4}}{\hbar^{1/2}} A_1 e^{-u^2/2} [1 - u^2] \right\} \\ &= \frac{(Cm)^{1/2}}{\hbar} A_1 \{-ue^{-u^2/2} [1 - u^2] + e^{-u^2/2} [-2u]\} \\ &= \frac{(Cm)^{1/2}}{\hbar} A_1 ue^{-u^2/2} \{u^2 - 3\} \\ &= \frac{(Cm)^{1/2}}{\hbar} \{u^2 - 3\} \psi_1 = \frac{(Cm)^{1/2}}{\hbar} \left\{ \frac{(Cm)^{1/2}}{\hbar} x^2 - 3 \right\} \psi_1\end{aligned}$$

La substitución de $d^2\psi_1/dx^2$ y E_1 en la ecuación que se supone que satisface, conduce a

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{(Cm)^{1/2}}{\hbar} \left\{ \frac{(Cm)^{1/2}}{\hbar} x^2 - 3 \right\} \psi_1 + \frac{C}{2} x^2 \psi_1 = \frac{3\hbar}{2} \left(\frac{C}{m} \right)^{1/2} \psi_1$$

Puesto que la inspección muestra que se satisface, la verificación está completa.


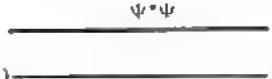
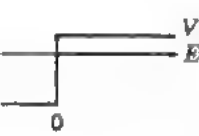
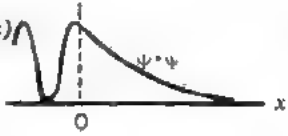

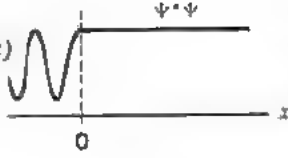
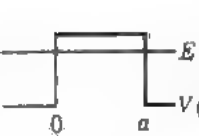
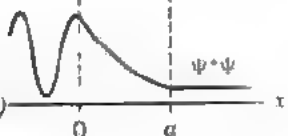
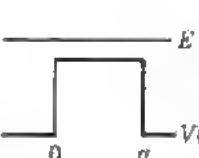
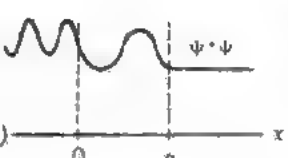
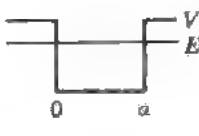
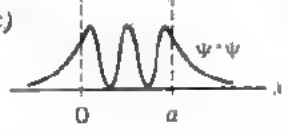
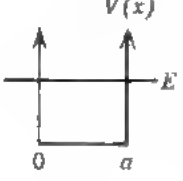
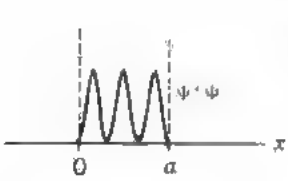
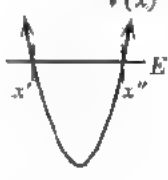
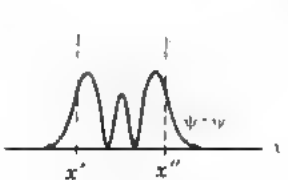
6.10 Resumen

En la tabla 6-2 se resumen algunas de las propiedades de los sistemas estudiados en este capítulo. La tabla da un nombre abreviado a cada sistema idealizado y un ejemplo de un sistema físico cuyo potencial y energía total están aproximados por aquél. También proporciona esquemas de las formas del potencial y energías totales y las correspondientes funciones de densidad de probabilidad para cada sistema. Si la partícula no está ligada, incide desde la izquierda. Se ha escogido un rasgo significativo para enlistar cada sistema en la tabla, pero existen muchos otros rasgos significativos que se han estudiado y no se han enlistado. De hecho, en este capítulo se han obtenido la mayoría de las predicciones importantes de la mecánica cuántica para sistemas que contienen una partícula que se mueve en un potencial unidimensional. En los capítulos siguientes se obtendrán predicciones a partir de la teoría para sistemas tridimensionales y de muchas partículas.

PREGUNTAS

1. ¿Puede haber soluciones a la ecuación de Schrodinger independiente del tiempo con $E < 0$ para el potencial cero?
2. ¿Por qué en la mecánica clásica nunca es posible tener $E < V(x)$? ¿Por qué en la mecánica cuántica sí es posible siempre que exista alguna región en la cual $E > V(x)$?
3. Explicar por qué la solución general a una ecuación de Schrödinger independiente del tiempo unidimensional contiene dos funciones distintas, mientras que la solución general a la ecuación de Schrödinger correspondiente contiene muchas funciones distintas.

TABLA 6-2. Resumen de los sistemas estudiados en el capítulo 6.

Nombre del sistema	Ejemplo físico	Energías potencial y total	Densidad de probabilidad	Rasgo importante
Potencial cero	Protón en haz de un ciclotrón			Resultados utilizados por otros sistemas
Potencial escalón (energía bajo la cima)	Electrón de conducción cerca de la superficie del metal			Penetración de la región excluida
Potencial escalón (energía abajo de la cima)	Neutrón intentando escapar del núcleo			Reflexión parcial en la discontinuidad del potencial
Barrera de potencial (energía bajo la cima)	Partícula tratando de escapar de la barrera de Coulomb			Tunelamiento
Barrera potencial (energía debajo de la cima)	Dispersión de electrón por átomo ionizado negativamente			No hay reflexión para ciertas energías
Pozo de potencial cuadrado finito	Neutrón ligado al núcleo			Cuantización de la energía
Pozo de potencial cuadrado infinito	Molécula estrictamente confinada a la caja			Aproximación al pozo cuadrado finito
Potencial de oscilador armónico simple	Átomo de molécula diatómica vibrante			Energía del punto cero

4. Considérese una partícula en un haz cuyo impulso se conoce con mucha precisión. Una función de onda en la forma de un grupo proporciona una descripción de la partícula, más o menos realista, que la de una función de onda exponencial compleja como la (6-9).
5. ¿Bajo qué condiciones una función potencial discontinua es una aproximación razonable a un sistema real?
6. Si una función potencial tiene una discontinuidad en cierto punto, ¿sus eigenfunciones tienen discontinuidades en ese punto? Si la respuesta es no, ¿Por qué?
7. Combinando ondas de igual amplitud y que viajan en direcciones opuestas se obtiene una onda estacionaria. ¿Qué tipo de onda se obtendrá si las amplitudes no son iguales?
8. ¿Qué es un flujo de probabilidad y por qué es útil?
9. ¿Cómo es posible que un flujo de probabilidad se desdoble en una discontinuidad del potencial no obstante que su partícula asociada no se desdobla?
10. ¿Existe una analogía entre el desdoblamiento de un flujo de probabilidad que caracteriza el comportamiento de una partícula no ligada en un sistema unidimensional y los caminos alternativos que puede seguir una partícula no ligada que se mueve en dos dimensiones a través de un aparato de difracción? ¿Por qué?
11. ¿Qué significa exactamente la afirmación de que el coeficiente de reflexión es igual a uno para una partícula que incide sobre un potencial escalón con energía total mayor que la altura del escalón? ¿Qué significa la afirmación de que el coeficiente de reflexión es menor que uno si la energía total es mayor que la altura del escalón? ¿El coeficiente de reflexión puede ser mayor que uno?
12. Puesto que la exponencial real es una función no oscilatoria, ¿por qué una exponencial compleja es una función oscilatoria?
13. ¿Qué es lo que usted piensa que causan las oscilaciones rápidas en el grupo de funciones de onda de la figura 6-8 cuando se ven reflejadas por el potencial escalón?
14. ¿Cuál es el error en la siguiente afirmación? "Puesto que no es posible detectar una partícula mientras hace un túnel a través de la barrera, no tiene sentido decir que el proceso ocurre realmente".
15. Una partícula incide sobre una barrera de potencial con energía total menor que la altura de la barrera y se ve reflejada. ¿La reflexión sólo se debe a la discontinuidad del potencial que se enfrenta a la dirección de incidencia? Si se quitara la otra discontinuidad, de manera que la barrera cambiara a un escalón, ¿cambiaría el coeficiente de reflexión?
16. En el sol, dos núcleos de masa pequeña en un movimiento térmico violento pueden chocar penetrando la barrera de Coulomb que los separa. La masa del núcleo que se forma es menor que la suma de las masas de los dos núcleos, de modo que hay energía liberada. Este proceso de *fusión* es el responsable del calor que emerge del sol. ¿Cuáles serían las consecuencias sobre la vida de la tierra si esto no pudiera ocurrir porque las barreras fueran impenetrables?
17. ¿Existen algunas consecuencias *mensurables* de la penetración de una región clásicamente excluida que es de longitud infinita? Considérese una partícula ligada en un pozo de potencial cuadrado finito.
18. Demuestre, a partir de un argumento cualitativo, que un pozo de potencial cuadrado infinito unidimensional siempre tiene un eigenvalor ligado sin importar qué tan poco profunda sea la región de ligadura. ¿Cómo se vería la eigenfunción si la región de ligadura fuera muy superficial?
19. ¿Por qué los pozos cuadrados finitos sólo tienen un número finito de eigenvalores ligados? ¿Cuáles son las características de los eigenvalores no ligados?
20. ¿Cómo se vería una eigenfunción de onda estacionaria para un eigenvalor no ligado de un pozo cuadrado finito?

21. ¿Por qué los eigenvalores y las eigenfunciones más bajas de un pozo cuadrado infinito proporcionan la mejor aproximación a los eigenvalores y eigenfunciones correspondientes de un pozo cuadrado finito?
22. En el estado $n = 3$, la función densidad de probabilidad para una partícula en una caja es cero en dos posiciones entre las paredes de la caja. ¿Entonces cómo puede moverse la partícula a través de estas posiciones?
23. Explicar en términos simples la relación entre la energía del punto cero y el principio de incertidumbre.
24. ¿Esperaría usted que la energía del punto cero tuviera mucho efecto sobre la capacidad calorífica de la materia a temperaturas muy bajas? Justifique su respuesta.
25. Si las eigenfunciones de un potencial tienen paridades definidas, la energía más baja siempre tiene paridad par. Explique por qué.
26. ¿Existen analogías en la física clásica para el concepto de paridad de la mecánica cuántica?
27. ¿Existen estados no ligados para un potencial de oscilador armónico simple? ¿Cuántos estados ligados existen? ¿Qué tan realista es el potencial?
28. Explicar todos los aspectos del comportamiento de todas las densidades de probabilidad de la tabla 6-2; en particular explicar la densidad de probabilidad para la barrera de potencial con energía superior a su cima.
29. ¿Cuáles son los otros rasgos significativos de los sistemas de la tabla 6-2?
30. Considerando separadamente cada uno de los sistemas tratados en este capítulo, establecer cuáles de sus propiedades están de acuerdo y cuáles en desacuerdo con la mecánica clásica en el límite microscópico. Cuáles concuerdan y cuáles no concuerdan con el movimiento ondulatorio clásico en ese límite. Hacer las mismas clasificaciones para las propiedades de los sistemas en el límite macroscópico.

PROBLEMAS

1. Demostrar que la eigenfunción del potencial escalón, para $E < V_0$ se puede convertir de la suma de dos ondas viajeras, como en (6-24), a una onda estacionaria como en (6-29).
2. Repetir los cálculos de la sección (6-24) para el potencial escalón, pero con la partícula inicialmente en la región $x > 0$ donde $V(x) = V_0$, viajando en la dirección en la que x decrece hacia el punto $x = 0$ donde el potencial escalón baja a su valor $V(x) = 0$ en la región $x < 0$. Demostrar que los coeficientes de transmisión y de reflexión son los mismos que los obtenidos en la sección (6-4).
3. Probar (6-43) partiendo de que la suma de los coeficientes de reflexión y de transmisión es igual a uno para el caso de un potencial escalón con $E > V_0$.
4. Probar (6-44) que expresa los coeficientes de reflexión y transmisión en términos de la razón E/V_0 .
5. Considérese una partícula que pasa por efecto túnel a través de una barrera de potencial rectangular. Escribir las soluciones generales presentadas en la sección 6-5 que proporcionan la forma para ψ en las distintas regiones del potencial. (a) Encontrar cuatro relaciones entre las cinco constantes arbitrarias acoplando ψ y $d\psi/dx$ en las fronteras entre las regiones. (b) Utilice estas relaciones para evaluar el coeficiente de transmisión T , verificando así (6-49). (Sugerencia: primero elimine F y G dejando las relaciones entre A , B y C ; a continuación elimine B .)
6. Demostrar que la expresión (6-49) para el coeficiente de transmisión cuando hay tunelamiento a través de una barrera de potencial rectangular se reduce a la forma mostrada en (6-50) si los exponentes son muy grandes.

7. Considere una partícula que pasa sobre una barrera de potencial rectangular. Escriba la solución general presentada en la sección 6-5 que da la forma para ψ en las distintas regiones del potencial. (a) Encontrar cuatro relaciones entre las cinco constantes arbitrarias acoplando ψ y $d\psi/dx$ en las fronteras entre las regiones. (b) Utilice estas relaciones para evaluar el coeficiente de transmisión T , verificando así (6-51). (Sugerencia: observe que las cuatro relaciones se hacen exactamente las mismas que las encontradas en la primera parte del problema 5 si se substituye k_{II} por ik_{III} . Haga esta substitución en (6-49) para obtener directamente (6-51).
8. (a) Evaluar el coeficiente de transmisión para un electrón de energía total 2 eV que incide sobre una barrera de potencial rectangular de altura 4 eV y espesor 10^{-10} utilizando (6-49) y enseguida (6-50). (b) Repetir la evaluación para una barrera de ancho 10^{-9} m.
9. Un protón y un deuterón (una partícula con la misma carga que un protón pero con el doble de masa) intentan penetrar una barrera de potencial de altura 10 MeV y ancho 10^{-14} m. Ambas partículas tienen una energía total de 3 MeV. (a) Mediante argumentos cualitativos pronostique cuál de las partículas tiene mayor probabilidad de éxito. (b) Evaluar cualitativamente la probabilidad de éxito para ambas partículas.
10. Una reacción de fusión muy importante para la producción de energía solar (ver pregunta 16) involucra la captura de un protón por un núcleo de carbón, el cual tiene seis veces la carga de un protón y un radio $r' \approx 2 \times 10^{-16}$ m. (a) Estimar el potencial de Coulomb V que experimenta el protón si está en la superficie del núcleo. (b) El protón incide sobre el núcleo debido a su movimiento térmico. En forma realista no se puede suponer que su energía total es mucho mayor que $10 kT$, donde k es la constante de Boltzmann (ver capítulo 1) y donde T es la temperatura interna del sol de alrededor de 10^7 °K. Estimar esta energía total y compararla con la altura de la barrera de Coulomb. (c) Calcular la probabilidad de que el protón pueda penetrar una barrera de potencial rectangular de altura V que se extiende desde r' hasta $2r'$ punto en el cual la barrera de potencial de Coulomb cae a $V/2$. (d) ¿La penetración a través de la barrera de potencial de Coulomb real es mayor o menor que a través de la barrera de potencial rectangular de la parte (c)?
11. Verificar, por substitución, que la solución general en ondas estacionarias (6-62), satisface la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (6-2), para el caso de un pozo de potencial cuadrado finito en la región interior del pozo.
12. Verificar, por substitución, que las soluciones generales en términos de exponenciales, (6-63) y (6-64) satisfacen la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (6-13) para el pozo de potencial cuadrado finito en las regiones exteriores al pozo.
13. (a) A partir de argumentos cualitativos haga un esquema de la forma de una *eigenfunción de onda estacionaria* típica para un pozo de potencial cuadrado finito. (b) ¿La amplitud de la oscilación es la misma para todas las regiones? (c) ¿Cuál es el comportamiento de la amplitud predicha alrededor de las probabilidades de encontrar la partícula en una longitud unitaria del eje x en las distintas regiones? (d) ¿La predicción está de acuerdo con lo que se esperaría de la mecánica clásica?
14. Utilice los argumentos cualitativos del Problema 13 para desarrollar una condición sobre la energía total de la partícula en un estado no ligado de un pozo de potencial cuadrado finito, que hace que la probabilidad de encontrar a la partícula en una unidad de longitud del eje x sea la misma tanto fuera como dentro del pozo. (Sugerencia: Lo importante es la relación entre la longitud de onda de de Broglie en el interior del pozo y el ancho del mismo).
15. (a) Haga un cálculo cuantitativo del coeficiente de transmisión para una partícula no ligada que se mueve sobre un pozo de potencial cuadrado finito. (Sugerencia: utilice un truco similar al indicado en el problema 7). (b) Encontrar una condición sobre la energía total de la partícula que haga que el coeficiente de transmisión sea igual a uno. (c) Compare con la condición que se encontró en el problema 14 y explique por qué son las mismas (d) Proporcione un ejemplo de un análogo óptico de este sistema.
16. Un átomo del gas noble criptón ejerce un potencial atractivo sobre un electrón no ligado que tiene un comienzo muy brusco. Debido a ello resulta una aproximación razonable el describir el potencial

como un pozo cuadrado atractivo de radio igual al radio del átomo de 4×10^{-10} m. Los experimentos demuestran que un electrón de energía cinética 0.7 eV en regiones exteriores al átomo puede viajar a través de él sin que existan reflexiones esenciales. Al fenómeno se le denomina *efecto Ramsauer*. Utilice esta información en las condiciones del problema 14 o 15 para determinar la profundidad del pozo cuadrado. (Sugerencia: una de las longitudes de onda de de Broglie cabe justo en el ancho del pozo. ¿Por qué no la mitad de la longitud de onda de de Broglie?)

17. Obtener una solución analítica, como en el apéndice G, para encontrar los primeros eigenvalores del potencial

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < -a/2 \text{ o } x > +a/2 \\ 0 & -a/2 < x < -a/4 \text{ o } +a/4 < x < +a/2 \\ v_0 & -a/4 < x < +a/4 \end{cases}$$

donde

$$v_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}$$

Comparar con la integración numérica del problema 31 del capítulo 5. (Sugerencia: (i) debido a la simetría de $V(x)$ la primera eigenfunción ψ deberá ser de paridad par. Esto significa que no puede haber un término senoidal en la forma supuesta para ψ en la región $-a/4 < x < +a/4$ que circunda a $x=0$. (ii). Debido a esta simetría, solamente es necesario acomodar ψ y $d\psi/dx$ en $x = +a/4$, y hacer $\psi = 0$ en $x = +a/2$).

18. Verificar, por substitución, que la solución general en términos de ondas estacionarias (6-67), satisface la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (6-2), para el pozo de potencial cuadrado infinito en la región interior del pozo.
19. En la figura (6-37) se muestran dos posibles eigenfunciones para una partícula que se mueve libremente en una región de longitud a pero que está confinada estrictamente a esta región. Cuando la partícula está en el estado que corresponde a la eigenfunción ψ_I , su energía total es 4eV. (a) ¿Cuál es la energía total correspondiente al estado ψ_{II} ? ¿Cuál es la energía total más baja posible para la partícula en este sistema?

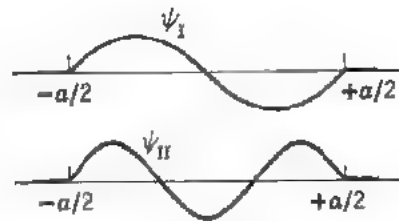


FIGURA 6-37

Dos eigenfunciones consideradas en el problema 19.

20. (a) Estimar la energía del punto cero para un neutrón en un núcleo tratándolo como si estuviera en un pozo cuadrado infinito de ancho igual al diámetro nuclear de 10^{-14} m. (b) Compare su respuesta con la energía del punto cero del electrón del ejemplo 6-6.
21. (a) Resuelva la ecuación de onda clásica que gobierna las vibraciones de una cuerda tensa y fija por ambos extremos. Demuestre que las funciones que describen las formas posibles que adopta la cuerda son esencialmente las mismas que las eigenfunciones para un pozo potencial cuadrado. (b) También demuestre que las posibles frecuencias de vibración de la cuerda son esencialmente diferentes de las frecuencias de las funciones de onda para el potencial.
22. (a) Para una partícula en una caja demuestre que la diferencia fraccionaria en la energía entre los valores adyacentes es

$$\frac{\Delta E_n}{E_n} = \frac{2n+1}{n^2}$$

(b) Utilice esta fórmula para analizar el límite clásico del sistema.

23. Aplicar la condición de normalización para demostrar que el valor de la constante multiplicativa para la eigenfunción $n=3$ del pozo de potencial cuadrado infinito (6-79), es $B_3 = \sqrt{2/a}$.
24. Utilice la eigenfunción del problema 23 para calcular los siguientes valores de **expectación** y comentar cada uno de los resultados: (a) \bar{x} , (b) \bar{p} , (c) $\bar{x^2}$, (d) $\bar{p^2}$.
25. (a) Use el resultado del problema 24 para evaluar el producto de la incertidumbre en posición por la incertidumbre en el impulso para una partícula en el estado $n=3$ de un pozo de potencial cuadrado infinito. (b) Compare con el resultado del ejemplo 5-10 y el problema 13 del capítulo 5 y comente sobre el tamaño relativo de los productos de incertidumbre para los estados $n=1, n=2$, y $n=3$.
26. Forme el producto de las eigenfunciones para el estado $n=1$ de un potencial de pozo cuadrado infinito con la eigenfunción para el estado $n=3$ del mismo potencial, integre sobre toda x y demuestre que el resultado es igual a cero. En otras palabras, demuestre que

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1(x) \psi_3(x) dx = 0$$

(Sugerencia: use la relación $\cos u \cos v = [\cos(u+v) + \cos(u-v)]/2$). Los estudiantes que hayan resuelto el problema 33 del capítulo 5 ya han demostrado que la integral sobre todas las x de la eigenfunción $n=1$ por la eigenfunción $n=2$ también es igual a cero. Se puede demostrar que la integral sobre todas las x de dos eigenfunciones diferentes es igual a cero. Además, esto es cierto para cualesquiera dos eigenfunciones diferentes de cualquier otro potencial. (Si las eigenfunciones son complejas en el integrando se toma el complejo conjugado de una). A esta propiedad se le llama **ortogonalidad**.

27. Aplicar el resultado del problema 20 del capítulo 5 al caso de una partícula en una caja tridimensional. Esto es, resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para una partícula que se mueve en un potencial tridimensional que es cero en el interior de una región cúbica del lado a y que se hace infinitamente grande fuera de esta región. Determinar los eigenvalores y las eigenfunciones para el sistema.
28. Los pasajeros de un avión observan con frecuencia que las alas de sus aeroplanos oscilan hacia arriba y hacia abajo con períodos del orden de 1 seg y amplitudes de aproximadamente 0.1 m. (a) Demostrar que esto en definitiva no se debe al movimiento del punto cero de las alas, comparando la energía del punto cero con la energía que se obtiene de los valores citados más una masa estimada para las alas. (b) Calcular el orden de magnitud del número cuántico n de las oscilaciones observadas.
29. La constante C de la fuerza de restitución para las vibraciones del espaciamiento interatómico de una molécula diatómica típica es aproximadamente 10^3 joules/m². Utilice este valor para estimar la energía del punto cero de las vibraciones moleculares.
30. (a) Estimar la diferencia en energía entre el estado base y el primer estado excitado de la molécula vibrante que se consideró en el problema 29. (b) A partir de esta estimación determine la energía del fotón emitido por las vibraciones en la distribución de carga cuando el sistema realiza una transición entre el primer estado excitado y el estado base. (c) Determine también la frecuencia del fotón y compárela con la frecuencia de oscilación clásica del sistema. (d) ¿En qué región del espectro electromagnético se encuentra?
31. Un péndulo que consiste de un peso de 1 kg en el extremo de una barra ligera de 1 m, oscila con una amplitud de 0.1 m. Evaluar las cantidades siguientes: (a) frecuencia de oscilación, (b) energía de oscilación, (c) valor aproximado del número cuántico por oscilación, (d) separación de energía entre energías permitidas adyacentes, (e) separación en distancia entre dos protuberancias adyacentes en las cercanías del punto de equilibrio de la función densidad de probabilidad.
32. Esboce un argumento simple para verificar que el exponente en la exponencial decreciente que gobierna el comportamiento de las eigenfunciones del oscilador armónico simple en la región clásicamente excluida es proporcional a x^2 . (Sugerencia: tome las eigenfunciones del pozo cuadrado finito de (6-63) y (6-64) y trate la cantidad ($V_0 = E$) como si creciera al crecer x proporcionalmente a x^2).

33. Verificar la eigenfunción y el eigenvalor para el estado $n=2$ de un oscilador armónico simple por sustitución directa en la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, como en el ejemplo 6-7.
34. Determinar las formas de las cinco primeras eigenfunciones del oscilador armónico simple evaluando los coeficientes de los polinomios a partir de las relaciones de recurrencia desarrolladas en el apéndice H.
35. Desarrolle, tanto como sea posible, un intento de hacer una solución directa por series para $(H-7)$ del apéndice H. Explicar claramente por qué fallan los intentos.

Apéndices

Teoría especial de la relatividad

Nuestro propósito al incluir este apéndice, es desarrollar aquellos resultados de la teoría de la relatividad especial de Einstein que se necesitarán en el estudio de la física cuántica. Por supuesto que esto es lo que muchos estudiantes han estudiado de relatividad en sus cursos de mecánica clásica y/o electromagnetismo, con anterioridad a iniciar sus estudios sobre física cuántica. Para estos estudiantes, este apéndice puede ser útil como un reposo. Para los otros, será útil como un tratamiento conciso de los resultados más importantes de la relatividad.

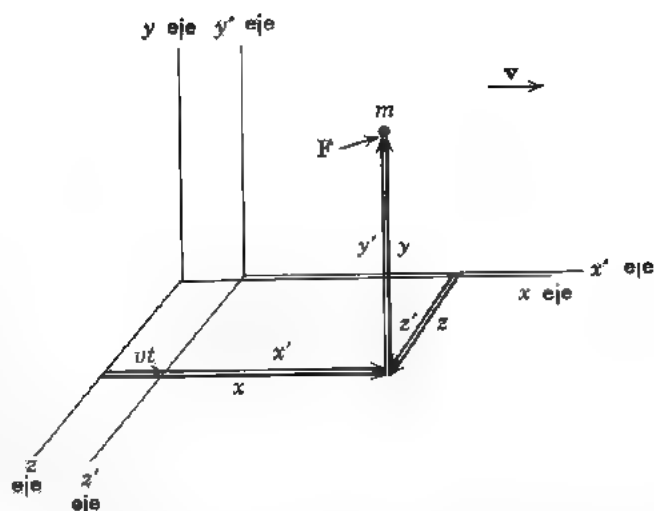
Las transformaciones de Galileo y la mecánica

En la física clásica, el estado de un sistema mecánico en algún instante se puede describir por completo construyendo un sistema de referencia y utilizarlo para especificar las coordenadas y las derivadas temporales de las coordenadas para las partículas que componen el sistema en ese instante. Si se conocen las masas de las partículas y las fuerzas que actúan entre ellas las ecuaciones de Newton del movimiento hacen posible el calcular el estado del sistema para cualquier tiempo futuro en términos de su estado en el instante inicial. A menudo, es deseable que durante o después de estos cálculos se especifique el estado del sistema en términos de un nuevo sistema de referencia que se mueve en traslación (es decir, que no gire) en relación al primer sistema y con velocidad constante. Surgen dos preguntas: (1) ¿Cómo se transformará la descripción del viejo al nuevo sistema de referencia? (2) ¿Qué le sucede a las ecuaciones que rigen el comportamiento del sistema cuando se hace la transformación? Estas preguntas son con las que trata la teoría de la relatividad especial. (En la teoría general, que no se necesitará en este estudio de la física cuántica, las transformaciones implican aceleración de un sistema con relación al otro).

La figura A-1 muestra una partícula de masa m , cuyo movimiento bajo la influencia de la fuerza F está especificado en términos de un sistema de referencia primo y uno no primo. El sistema primo se mueve en relación al no primo con velocidad constante v en una dirección que, por construcción, es la dirección positiva de los ejes x , y x' colineales. Por definición, los tiempos t' y t medidos en los dos sistemas son ambos cero en el instante en el que el plano $y'z'$ coincide con el plano yz . Con estos 4 sistemas existen dos conjuntos de 4 números (x', y', z', t') y (x, y, z, t) , que se pueden utilizar igualmente bien para

FIGURA A-1

Sistema de referencia x', y', z', t' que se mueve en traslación con velocidad constante v relativa a un sistema, x, y, z, t . Los ejes x y x' se suponen colineales.



especificar las coordenadas de las partículas para cualquier instante. ¿Cuáles son las relaciones entre estos conjuntos de números? Según la física clásica éstas son.

$$\begin{aligned}x' &= x - vt \\y' &= y \\z' &= z \\t' &= t\end{aligned}\tag{A-1}$$

Se conocen como las *transformaciones galileanas*. Los argumentos sencillos de la física clásica que conducen a ellas son:

1. Si se define que los ceros de las escalas de tiempo utilizadas en los diferentes sistemas son los mismos para cualquier tiempo y lugar, entonces en la física clásica ambas escalas de tiempo permanecerán invariables para todos los tiempos y todos los lugares, así que $t' = t$.
2. Ya que por construcción los planos $x'y'$ y xy siempre coinciden, se tiene $z' = z$; y de manera similar $y' = y$.
3. Ya que en el intervalo de tiempo entre 0 y $t' = t$ el plano $y'z'$ se mueve en la dirección positiva una distancia vt , la coordenada x' se hará menor que la coordenada x por esta misma cantidad. Así que $x' = x - vt$.

Las transformaciones galileanas constituyen la respuesta que la física clásica da a la primera pregunta planteada.

La respuesta a la segunda pregunta está dada en la mecánica clásica cuando se utilizan las transformaciones de Galileo para convertir las ecuaciones de Newton en el sistema x, y, z, t .

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = F_x \quad m \frac{d^2y}{dt^2} = F_y \quad m \frac{d^2z}{dt^2} = F_z\tag{A-2}$$

Cualesquiera que sea la forma que tengan estas ecuaciones, en el sistema x', y', z', t' . Obsérvese que para que (A-2) sea válido el sistema x, y, z, t , deberá ser una *sistema inercial*; es decir, uno en el cual un cuerpo que no está afectado por ninguna fuerza, e inicialmente en reposo, permanezca en reposo.

Diferenciando cada una de las tres primeras ecuaciones (A-1) dos veces respecto a t y utilizando la cuarta para escribir $t = t'$ es trivial demostrar que

$$\frac{d^2x'}{dt'^2} = \frac{d^2x}{dt^2}, \quad \frac{d^2y'}{dt'^2} = \frac{d^2y}{dt^2}, \quad \frac{d^2z'}{dt'^2} = \frac{d^2z}{dt^2}$$

En otras palabras, la aceleración de la masa m medida en el sistema primo es la misma que cuando se la mide en el sistema no primo. Por supuesto, la razón es que dos sistemas relacionados por una transformación de Galileo no están acelerados entre sí, de modo que la transformación no cambia la medida de la aceleración. Por lo tanto,

$$F_{x'} = F_x \quad F_{y'} = F_y \quad F_{z'} = F_z$$

Debido a que la componente de la fuerza F que actúa sobre m en la dirección del eje x' o x es la misma vista en cualesquier sistema y similarmente para sus otras componentes. Evaluando las componentes no primadas de la aceleración y de la fuerza en (A-2) en términos de sus contrapartes primadas, pero no haciendo nada con la masa, ya que en la física clásica la masa es una propiedad intrínseca de una partícula cuyo valor no puede depender del sistema de referencia se encuentran las ecuaciones del movimiento en el sistema primado.

$$m \frac{d^2 x'}{dt'^2} = F_{x'} \quad m \frac{d^2 y'}{dt'^2} = F_{y'} \quad m \frac{d^2 z'}{dt'^2} = F_{z'} \quad (\text{A-3})$$

Observe que (A-3) tiene exactamente la misma forma matemática que (A-2). Por lo tanto, parte de la respuesta a la segunda pregunta es que las ecuaciones de Newton, que gobiernan el comportamiento del sistema mecánico, no cambian cuando se hace una transformación galileana. El sistema x, y, z, t era un sistema inercial ya que $d^2 x/dt^2 = d^2 y/dt^2 = d^2 z/dt^2 = 0$ si $F = 0$. De (A-3) se deduce que x', y', z', t' también es un sistema inercial ya que $d^2 x'/dt'^2 = d^2 y'/dt'^2 = d^2 z'/dt'^2 = 0$ si $F = 0$.

Como las ecuaciones de Newton son idénticas en cualesquiera dos sistemas inerciales y como el comportamiento de un sistema mecánico está gobernado por estas ecuaciones, se sigue que el comportamiento de todos los sistemas mecánicos será idéntico en todos los sistemas inerciales, no obstante que estos sistemas se mueven a velocidad constante uno respecto a otro. Esta predicción se verifica por una amplia variedad de evidencias experimentales.

Las transformaciones galileanas y el electromagnetismo

A continuación nos preguntamos sobre el comportamiento de los sistemas electromagnéticos cuando se realiza una transformación galileana. Los fenómenos electromagnéticos se tratan en la física clásica en términos de las ecuaciones de Maxwell, las cuales gobiernan sus comportamientos así como las ecuaciones de Newton gobiernan el comportamiento de los fenómenos mecánicos. En realidad, no se procederá a aplicar transformaciones galileanas a las ecuaciones de Maxwell, como se hizo a las ecuaciones de Newton ya que este cálculo es complicado; en vez de esto se mencionarán los resultados: las ecuaciones de Maxwell cambian su forma matemática bajo una transformación galileana, en marcado contraste con el comportamiento de las ecuaciones de Newton. También se estudiará el significado físico de estos resultados.

Como probablemente sepa el estudiante, las ecuaciones de Maxwell predicen la existencia de disturbios electromagnéticos que se propagan a través del espacio en la manera característica del movimiento ondulatorio. Los físicos del siglo XIX quienes eran muy mecanicistas en su visión, creían que era evidente que la propagación de las ondas predicha por las ecuaciones de Maxwell requiriera la existencia de un medio de propagación mecánico. De la misma manera que las ondas de sonido se propagan a través de un medio mecánico, el aire, así que de

acuerdo con su punto de vista, las ondas electromagnéticas se deberían propagar a través de un medio mecánico al que llamaron *el éter*. A este medio de propagación se le exigían propiedades muy extrañas con objeto de que se ajustara a ciertos hechos conocidos. Por ejemplo, no debería tener masa, ya que las ondas electromagnéticas tales como la luz, pueden viajar en el vacío; pero debería tener propiedades elásticas para ser capaz de transmitir las vibraciones inherentes a la idea del movimiento ondulatorio. No obstante, los físicos de esta era pensaron que el concepto del éter era más atractivo que la alternativa de ondas electromagnéticas propagándose sin la ayuda de un medio de propagación.

Se supuso que las ecuaciones electromagnéticas en la forma presentada por Maxwell eran válidas para el sistema de referencia en reposo respecto al éter, el llamado *sistema del éter*. Una solución de estas ecuaciones lleva a una predicción de la magnitud de la velocidad de propagación de las ondas electromagnéticas en el vacío. El resultado es $2.998 \times 10^8 \text{ m/seg} = c$, que concuerda dentro del error experimental con el valor de la velocidad de la luz que había sido medido por Fizeau. Sin embargo, en un sistema de referencia moviéndose con velocidad constante con respecto al éter, las ecuaciones de Maxwell cambian de forma cuando se usan las transformaciones de Galileo para evaluarlas en dicho sistema en movimiento. Como era de esperarse, cuando se utilizan estas ecuaciones cambiadas para obtener una predicción de la velocidad de la propagación de la onda electromagnética que debería medirse en el sistema en movimiento respecto al éter, se encontró que la velocidad tenía una magnitud diferente de c .

Los cálculos complicados que predicen la velocidad de la luz medida en un sistema de referencia que se mueve con respecto al éter, realizados mediante una transformación de Galileo de las ecuaciones de Maxwell para el sistema en movimiento, y resolviéndolas en este sistema, llevan a la predicción simple

$$v_{\text{sist. móvil cra. éter}} - v_{\text{luz cra. éter}} = v_{\text{luz cra. sist. móvil}} \quad (\text{A-4})$$

donde *cra* significa con respecto a, y $v_{\text{luz cra. éter}} = c$. La predicción está de acuerdo con dos ideas físicas simples:

1. La luz se propaga con una velocidad de magnitud fija c con respecto a su medio de propagación, el éter, justo como las ondas sonoras se propagan con una velocidad de magnitud fija con respecto a su medio de propagación, el aire.
2. La velocidad de la luz con respecto a un sistema que se mueve respecto al éter se puede encontrar a partir de una adición normal de vectores de velocidad relativa.

Deberá apuntarse que los argumentos que justifican la adición vectorial de velocidades son realmente los mismos que justifican la transformación galileana. Por ejemplo, en un caso en el que todo el movimiento es a lo largo del eje x' o x , se pueden obtener (A-4) inmediatamente, mediante una diferenciación respecto al tiempo de la primera de las ecuaciones (A-1), utilizando también la cuarta $t' = t$.

En resumen la física teórica a fines del siglo XIX estaba basada en tres cosas fundamentales: las ecuaciones de Newton, las ecuaciones de Maxwell y las transformaciones galileanas. Casi cualquier cosa que pudiera derivarse de estas tres concordaba bien con los experimentos que se habían realizado para entonces. En relación con las preguntas que se han analizado, ellas predecían que los sistemas de referencia en movimiento uniforme con respecto a otros eran completamente equivalentes, según los fenómenos mecánicos que se trataban, pero respecto a los fenómenos electromagnéticos no eran equivalentes; solamente existía un sistema, el sistema del éter, en el cual la velocidad de la luz tenía una magnitud con un valor numérico c .

El experimento de Michelson-Morley

En 1887 Michelson y Morley realizaron un experimento que resultó ser de gran importancia. El experimento se diseñó para investigar el movimiento de la tierra respecto al sistema de referencia del éter. Puesto que la tierra se mueve alrededor del sol, parecería poco realista hacer una suposición *a priori* acerca de que el sistema del éter viaja con la tierra, y como se indicará posteriormente, las observaciones experimentales de aquel tiempo estaban en contra de todas las suposiciones. Sería mucho más razonable suponer que el sistema del éter estaba en reposo con respecto al centro de masas del sistema solar o al centro de masas del universo. En el primer caso, la velocidad de la tierra respecto al sistema del éter tendría una magnitud del orden de 10^4 m/seg; en el segundo caso, la magnitud de la velocidad debería ser algo mayor. La idea básica del experimento era medir la velocidad de la luz en dos direcciones perpendiculares en un sistema de referencia fijo a la tierra. Consideraciones sobre los impulsos según la teoría clásica, como se resume mediante la adición vectorial (A-4), mostrarán que la teoría predice que las velocidades deberán tener magnitudes diferentes cuando la luz viaja en direcciones diferentes con relación a la dirección de movimiento del observador a través del éter.

A pesar de que la diferencia en las dos mediciones de la velocidad de la luz se esperaba pequeña, debido a que la velocidad de la tierra respecto al éter es pequeña comparada con la velocidad de la luz y respecto al éter, Michelson y Morley construyeron un dispositivo que contenía un interferómetro que lo hacía bastante más sensible que lo necesario para detectar y medir la diferencia. Para su gran sorpresa, no les fue posible detectar ninguna diferencia. Ellos y muchos otros investigadores repitieron las mediciones con equipo mejorado pero nunca observaron el efecto. A pesar de las predicciones de la teoría clásica, el experimento de Michelson y Morley mostró que la velocidad de la luz tiene la misma magnitud c , medida en direcciones perpendiculares en un sistema de referencia que, presumiblemente, se mueve a través del sistema de referencia del éter.

Estos resultados atrajeron la atención de muchos físicos, y varios de ellos trataron de dar explicaciones que concordaran con los resultados de Michelson y Morley. Las teorías más notables fueron "*la hipótesis del arrastre del éter*" y "*la teoría de la emisión*".

La hipótesis del arrastre del éter supone que el sistema del éter estaba atado localmente a todos los cuerpos de masa finita. Era atractiva porque podía explicar los resultados de Michelson y Morley y no involucraba modificaciones de las teorías existentes. Pero no podía ser aceptada por varias razones, la principal tenía que ver con el fenómeno astronómico llamado aberración estelar. Para 1700 ya se conocía que las posiciones aparentes de las estrellas se movían anualmente en círculos de diámetros muy pequeños. Este es un efecto puramente cinemático debido al movimiento de la tierra alrededor del sol; de hecho, es el mismo que el efecto que causa que una gota de lluvia vertical parezca caer a un ángulo con la vertical para un observador en movimiento. De esta analogía es fácil ver que la aberración estelar no se presentaría si la luz viajara con velocidad de magnitud fija respecto al sistema del éter y si ese sistema fuera arrastrado por la tierra.

En la teoría de la emisión, las ecuaciones de Maxwell se modifican de tal modo que la velocidad de la luz se mantiene asociada con la velocidad de su fuente. Esto también explicaría los resultados de Michelson y Morley puesto que sus fuentes luminosas estaban fijas al interferómetro utilizado para medir la diferencia de velocidad de la luz, pero se podría rechazar debido a los conflictos que presenta

con las medidas astronómicas concernientes a las estrellas binarias. Las estrellas binarias son pares de estrellas que giran rápidamente alrededor de sus centros de masas comunes. Considere un par en un instante en el que una se mueve hacia la tierra y la otra se aleja de ella, entonces, si la teoría de la emisión es válida, con relación a la tierra, la velocidad de la luz proveniente de una de las estrellas sería mayor que desde la otra. Esto causaría que las estrellas aparentaran moverse en órbitas muy poco usuales. Sin embargo, en 1913 De Sitter demostró que los movimientos observados en las estrellas binarias se explican adecuadamente por la mecánica newtoniana cuando la velocidad de la luz que éstas emiten se considera con una magnitud independiente de su movimiento.

Toda la evidencia experimental (incluyendo la evidencia proveniente de varios experimentos contemporáneos de extremada precisión) sólo concuerda con la conclusión de que no existe un *sistema de referencia especial*, el sistema del éter, con la única propiedad de que la velocidad de la luz medida en ese sistema tiene una magnitud igual a c . Así como para los sistemas inerciales y los fenómenos mecánicos, *todos los sistemas* en movimiento relativo con velocidad constante son equivalentes en cuanto a que la velocidad de la luz medida en cada uno de estos sistemas tiene la misma magnitud c . Para resumir la *evidencia experimental*:

La velocidad de la luz en el vacío es independiente del movimiento del observador y del movimiento de la fuente.

Postulado de Einstein

En 1905, Albert Einstein fue el primero en impulsar a que los físicos abandonaran el concepto erróneo e infructuoso del éter. En esencia él aceptaba el hecho de que la luz se propaga a través del vacío, y que el vacío, en realidad ¡está vacío! Sin el sistema de referencia del éter, el único sistema de referencia que puede tener algún significado para un observador que mide la velocidad de la luz es el sistema fijo a él mismo. Entonces, no es sorprendente que un observador obtenga, en todos los casos, el mismo resultado numérico c , cuando mide la magnitud de la velocidad de la luz. Como un postulado Einstein estableció:

Las leyes de los fenómenos electromagnéticos, así como las leyes de la mecánica, son las mismas en todos los sistemas de referencia inerciales, sin importar el hecho de que uno se mueva respecto a otro. En consecuencia, todos los sistemas inerciales son completamente equivalentes para todos los fenómenos.

Este postulado requería que Einstein modificara las ecuaciones de Maxwell o las transformaciones de Galileo, ya que las dos juntas implican lo contrario del postulado. Sin embargo, como en 1905 la teoría de la emisión parecía aceptable, él optó por no modificar las ecuaciones de Maxwell y entonces se vio forzado a modificar las transformaciones de Galileo. Este fue un movimiento muy audaz. La creencia intuitiva en la validez de las transformaciones galileanas era tan fuerte que sus contemporáneos, nunca las cuestionaron fuertemente. Además, como se verá posteriormente, las transformaciones tan distintas que adoptó Einstein en substitución de las de Galileo están basadas en consideraciones físicas realistas, mientras que las transformaciones galileanas son claramente no realistas. Otra indicación de la audacia de Einstein es que las primeras consideraciones implican que cualquier modificación a las transformaciones galileanas requerirían alguna modificación que compensara las ecuaciones de Newton, de modo que el postulado continúe satisfaciéndose para la mecánica. Pronto se verá a qué resultado conduce esto, pero primero se habrán de estudiar las nuevas ecuaciones de transformación.

Simultaneidad

Considérese la cuarta de las transformaciones de Galileo (A-1) que es

$$t' = t$$

La ecuación establece que existe la misma escala de tiempos para todos los sitios y todo instante en cualesquiera dos sistemas de referencia moviéndose uniformemente uno respecto al otro. Esto equivale a decir que existe una escala universal de tiempo para esos sistemas. ¿Esto es cierto? Para definirlo se deberá investigar en forma realista los procedimientos utilizados para la medición del tiempo.

Primero se atacará el problema de definir una escala de tiempos para un solo sistema. Ahora el proceso básico involucrado en cualquier medición del tiempo es una medida de simultaneidad. Como Einstein escribió: "Si digo: El tren llega aquí a las 7 en punto, quiero decir algo como esto: el que la manecilla pequeña de mi reloj apunte el 7 y la llegada del tren son eventos simultáneos". Por supuesto que no existe ningún problema en determinar la simultaneidad de eventos que ocurren esencialmente en un mismo lugar, como el tren y el reloj *cercano* utilizado para medir la hora de llegada. Pero existe un problema para determinar la simultaneidad de eventos que ocurren en sitios *separados*. De hecho, este es el meollo del problema de poner una escala de tiempo para un sistema de referencia. Para tener una escala de tiempo válida para un sistema de referencia completo se habría de tener un gran número de relojes distribuidos en todo el sistema del tal modo que en cualquier punto que se quisiera medir se pudiera utilizar un reloj muy cercano al punto deseado. Estos relojes deberían estar sincronizados; esto es, se debería ser capaz de decir de cualesquiera de estos dos relojes separados A y B.: "La manecilla pequeña del reloj A y la manecilla pequeña del reloj B apuntaron las 7 simultáneamente".

Probablemente, ahora se le ocurran al estudiante un gran número de métodos para determinar la simultaneidad en sitios separados. Todos estos métodos seguramente implican la transmisión de señales entre los dos puntos. Si se tuviera a nuestra disposición un método para transmitir señales con velocidad infinita, no habría más problema en determinar la simultaneidad de eventos que ocurren en sitios distantes, que el que existe para hacerlo para eventos que ocurren en el mismo lugar. Aquí es donde falla la transformación de Galileo al suponer implícitamente la existencia de tal método de sincronización. De hecho, no existe ese método y puesto que se está de acuerdo en ser realista al desarrollar una escala de tiempo, se deberá utilizar señales reales para sincronización.

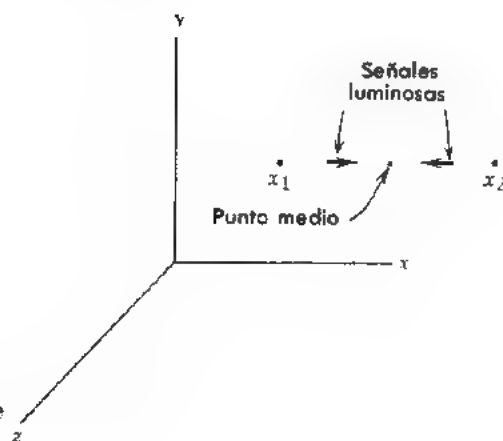
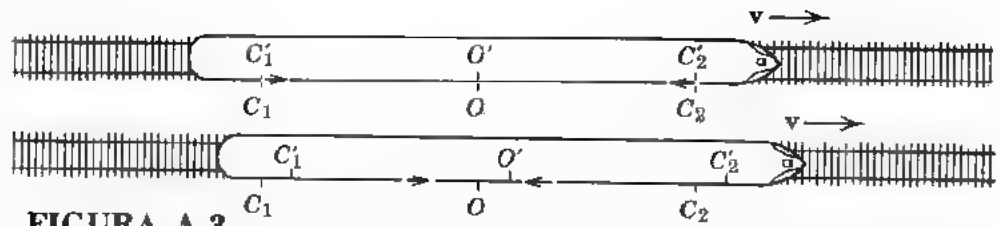


FIGURA A-2

Ilustración de la definición de Einstein de simultaneidad.

**FIGURA A-3**

Dos vistas sucesivas de un tren moviéndose con velocidad constante v desde el punto de vista de un observador O en la tierra. Las flechas pequeñas indican los destellos luminosos.

Evidentemente, la señal más apropiada será la luz (u otra señal electromagnética) ya que estas tienen la misma velocidad de propagación bajo cualquier circunstancia. Esta propiedad simplifica enormemente el proceso de determinar la simultaneidad. Entonces se llega a la *definición Einsteiniana de simultaneidad de eventos separados*:

Un evento que ocurre al tiempo t_1 y el punto x_1 es simultáneo con un evento que ocurre al tiempo t_2 y en el punto x_2 si señales luminosas emitidas en t_1 desde x_1 y en t_2 donde x_2 llegan simultáneamente al punto medio entre x_1 y x_2 .

Esta definición, que se muestra en la figura A-2, establece que dos eventos separados son simultáneos para un observador situado en el punto medio si él ve que ocurren simultáneamente. Observe que en la teoría de Einstein, la simultaneidad en el tiempo no tiene un significado absoluto, independiente de la localización espacial, como lo tiene en la teoría clásica. La definición mezcla íntimamente los tiempos t_1 y t_2 y las coordenadas espaciales x_1 y x_2 .

Una consecuencia de esto es que dos eventos que son simultáneos cuando se observan desde un sistema de referencia por lo general no son simultáneos cuando se observan desde un segundo sistema de referencia que se está moviendo en relación al primero. Para ver esto, considere un "experimento imaginario" muy simple, adaptado de uno utilizado por Einstein. La figura A-3 ilustra la siguiente secuencia de eventos desde el punto de vista de un observador O que está en reposo en relación a tierra. Dicho observador tiene colocadas dos cargas de dinamita C_1 y C_2 de modo que las distancias $\overline{OC_1}$ y $\overline{OC_2}$ son iguales. Utilizando como detonador una señal luminosa que envía simultáneamente hacia C_1 y C_2 los hace explotar simultáneamente en su sistema de referencia. (El está utilizando un recíproco de la definición anotada arriba). Suponga que lo hace de tal modo que, en su sistema, las explosiones ocurren cuando está de frente a O' un observador situado en un tren que se mueve con una velocidad muy grande v . Las explosiones dejan marcas C'_1 y C'_2 sobre un lado del tren. Después del experimento, O' puede medir las distancias $\overline{O'C'_1}$ y $\overline{O'C'_2}$. Las encontrará iguales ya que de otra forma el espacio no sería homogéneo. Las explosiones también producen destellos luminosos. El observador O recibirá los destellos simultáneamente, confirmando que en su sistema las explosiones ocurrieron simultáneamente. Sin embargo O' recibirá el destello que se originó en C'_2 antes de recibir el destello proveniente de C'_1 simplemente porque el tren se movió durante el tiempo finito requerido para que la luz lo alcance. Puesto que las explosiones ocurrieron en puntos equidistantes de O' pero las señales luminosas no se recibieron simultáneamente, él deberá concluir que en su sistema de referencia las explosiones no fueron simultáneas.

Estos desacuerdos en la simultaneidad conducen a resultados interesantes. Desde el punto de vista de O , $\overline{C_1C_2} = \overline{C'_1C'_2}$. Pero de acuerdo con O' , C'_2 pasa por C_2 antes de que C'_1 pase por C_1 ya que él recibió primero la señal de C'_2 .

Por lo tanto O' deberá concluir que $\overline{C_1 C_2} = C_1' C_2'$. Si esto no es evidente, es posible demostrarlo construyendo diagramas que muestran la secuencia de eventos desde el punto de vista de O' . El desacuerdo en la simultaneidad también causará que los dos observadores estén en desacuerdo en el ritmo que tienen los relojes en sus respectivos sistemas de referencia. Como se verá, la naturaleza de sus desacuerdos acerca de las medidas de distancia e intervalos de tiempo son tales que les permite a ambos O y O' el encontrar el mismo valor c para la velocidad de los pulsos de luz que provienen de C_1 y C_2 .

Dilación del tiempo y contracción de las longitudes

Considerando aquí un segundo experimento imaginario diseñado para facilitar la evaluación cualitativa de dos efectos relativistas que se apuntaron cualitativamente en el experimento imaginario anterior. Un observador O' que se mueve con velocidad v relativa al observador O , desea comparar un intervalo de tiempo medido con su reloj con una medida del mismo intervalo hecha con relojes que pertenecen a O . El ya ha establecido que, cuando está en reposo respecto a otro observador, todos los relojes corren al mismo ritmo y están sincronizados. Ahora es evidente que, aún en movimiento relativo, la lectura de un reloj O' se puede comparar, sin complicaciones con la lectura de un reloj O que momentáneamente coincide con el de O' . Por lo tanto, las mediciones de un intervalo de tiempo hechas con relojes en los dos sistemas se pueden comparar mediante el procedimiento ilustrado en la figura A-4. O' manda una señal luminosa a un espejo que la refleja de regreso a él. Tanto O como O' registran la emisión de la señal con relojes C_1 y C_1' que coinciden en este instante. Para registrar el tiempo de su recepción, utilizan los relojes C_2 y C_2' que coinciden cuando se recibe de regreso del espejo la señal luminosa. Los dos eventos que definen el principio y final del intervalo de tiempo por comparar son la emisión y recepción de la señal luminosa.

El tiempo transcurrido entre estos dos eventos según O' es $T' = 2\Delta t'$. De la figura y del teorema de Pitágoras, es evidente que

$$c^2 \Delta t'^2 = v^2 \Delta t^2 + l^2$$

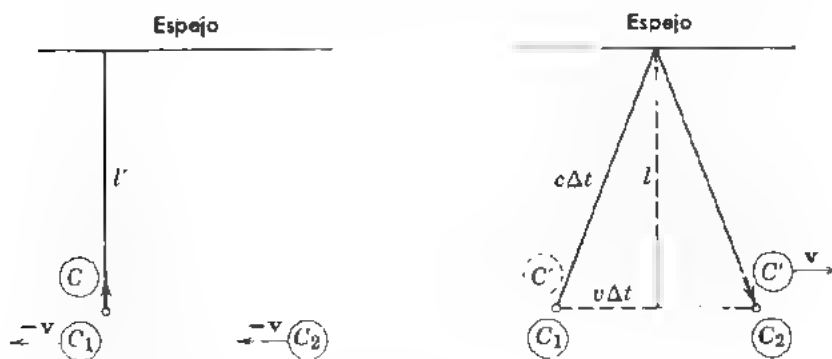


FIGURA A-4

Comparación de un intervalo de tiempo medido por dos observadores. *Izquierda:* La figura muestra la situación en el instante de la emisión de una señal luminosa (flecha pequeña) desde el punto de vista de O' . *Derecha:* La figura muestra la situación en el instante de su recepción desde el punto de vista de O .

donde l es la distancia al espejo medida por O . Resolviendo para Δt , se tiene

$$\Delta t^2 = \frac{l^2}{c^2 - v^2} = \frac{l^2}{c^2} \frac{1}{1 - v^2/c^2}$$

o

$$\Delta t = \frac{l}{c} \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

Ahora es fácil demostrar que los observadores en movimiento relativo no pueden discrepar acerca de la medida de las distancias *perpendiculares* a la dirección de movimiento ya que los desacuerdos sobre la simultaneidad tienen que ver con la sincronización de las señales con tiempos de propagación finitos en la dirección paralela a la dirección del movimiento relativo. Entonces se tiene $l = l'$ y así

$$\Delta t = \frac{l'}{c} \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} = \frac{\Delta t'}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

de donde se obtiene

$$T = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} T' \quad (\text{A-5})$$

Se ha encontrado que la medición de un intervalo de tiempo entre dos eventos que ocurren en el mismo lugar en cierto sistema, resulta *mayor* por un factor $1/\sqrt{1 - v^2/c^2}$ en un sistema que se mueve con relación al primero y en el cual, consecuentemente, los dos eventos ocurren en lugares separados. Al intervalo de tiempo medido en el sistema en el cual los eventos ocurren en el mismo lugar se le denomina *tiempo propio* y al efecto involucrado *dilación del tiempo*.

A continuación considere el mismo experimento imaginario pero imagine que en el sistema O coloca una regla para medir con un extremo en el reloj C_1 y el otro en el reloj C_2 . Designe por L la longitud de la regla medida en el sistema O , respecto al cual está en reposo. Se desea evaluar L' la longitud de la regla medida en el sistema O' .

En este sistema, la regla se mueve en una dirección paralela a su propia longitud. Puesto que la velocidad de O' respecto a O es v , la velocidad de O y también de la regla, respecto O' será precisamente $-v$. De otra manera, habría una simetría inherente entre los dos sistemas que no está permitida por el postulado de Einstein. T' es el intervalo de tiempo entre el instante cuando O' ve que el extremo anterior de la regla pasa su reloj C' y el instante cuando él ve que el extremo posterior pasa por el reloj. Este intervalo de tiempo está relacionado con la longitud L' de la regla (medida en el sistema O') y con la magnitud v de su velocidad (medida en el mismo sistema) mediante la ecuación

$$L' = vT'$$

También es posible establecer una ecuación que relacione las cantidades correspondientes medidas en el sistema O . En este sistema C' que se mueve con velocidad de magnitud v , recorre la distancia L en el tiempo T . Entonces,

$$L = vT$$

De las dos últimas ecuaciones se obtiene

$$L' = L \frac{T'}{T}$$

Pero el argumento de la dilación del tiempo muestra que

$$\frac{T'}{T} = \sqrt{1 - v^2/c^2}$$

Por lo tanto,

$$L' = \sqrt{1 - v^2/c^2} L \quad (\text{A-6})$$

Se ha encontrado que una regla es más corta, por un factor $\sqrt{1 - v^2/c^2}$ comparada con su longitud medida en un sistema en el cual está en reposo, cuando la medición de ella se hace en un sistema en el cual se está moviendo paralelo a su propia longitud. A la longitud de la regla medida en el sistema en el cual está en reposo se le denomina *longitud propia* y al efecto *contracción de Lorentz*. Observe que una comparación de (A-6) con la ecuación inmediata anterior, muestra que el factor que relaciona al intervalo de tiempo primo con el no primo es el mismo (y no el recíproco) que el factor que relaciona el intervalo referente primo con el no primo.

La transformación de Lorentz

Ahora se obtendrán las ecuaciones que se usan en la teoría de la relatividad para transformar las variables de espacio y tiempo de un sistema, a otro que se mueve con velocidad constante respecto al primero. Este argumento estará guiado por lo que se ha aprendido, pero en el análisis final existe una derivación independiente basada en la evidencia experimental de que la velocidad de la luz es independiente del movimiento del observador y de la fuente.

Considere un tercer experimento imaginario con los observadores O' y O , con O' moviéndose con relación a O a velocidad de magnitud v en la dirección positiva de los ejes x' y x . Como en la figura A-1 sus planos $x'y'$ y xy coinciden siempre y los orígenes de sus sistemas de referencia coinciden al instante $t' = t = 0$. En este instante, O' enciende un bulbo localizado en su origen y se produce un frente de onda de luz que se extiende en todas direcciones desde el punto de emisión con velocidad de magnitud c . Por lo tanto, según O' al tiempo t' el frente de onda será una esfera centrada en su origen de radio $r' = ct'$. Las coordenadas de cualquier punto sobre el frente de onda para este instante satisfará la ecuación de una esfera.

$$x'^2 + y'^2 + z'^2 = c^2 t'^2 \quad (\text{A-7})$$

Pero igualmente será cierto que según O la luz se extiende en todas direcciones desde el punto de emisión, su origen, con velocidad de magnitud c . Entonces, desde el punto de vista de O el frente de onda al tiempo t también es una esfera de radio $r = ct$ con centro en su propio origen y satisfará la ecuación

$$x^2 + y^2 + z^2 = c^2 t^2 \quad (\text{A-8})$$

Se encontrarán relaciones entre los dos conjuntos de variables (x', y', z', t') y (x, y, z, t) que permitan que tanto (A-7) como (A-8) sean válidas, es decir, que transformen una ecuación en la otra.

Según las consideraciones anteriores, se puede suponer la forma siguiente para las ecuaciones de transformación

$$\begin{aligned}
 x' &= \gamma(x - vt) \\
 y' &= y \\
 z' &= z \\
 t' &= \gamma(t + \delta)
 \end{aligned}
 \tag{A-9}$$

donde γ es una cantidad adimensional, que presumiblemente contiene la velocidad relativa v entre los dos sistemas y la velocidad de la luz c , y donde δ es una cantidad que también presumiblemente contiene dichas velocidades y que deberá tener dimensiones de tiempo. Pronto se determinarán expresiones para γ y δ pero desde ahora se puede decir que se tendrá $\gamma \rightarrow 1$ y $\delta \rightarrow 0$ si $v/c \rightarrow 0$. La razón es que para $\gamma = 1$ y $\delta = 0$ (A-1) se reduce a la transformación galileana (A-1) lo cual es congruente ya que las transformaciones de Galileo deberán de ser esencialmente correctas si la velocidad relativa v de los sistemas es extremadamente pequeña comparada con la velocidad c de las señales utilizadas para sincronizar los relojes de los sistemas. En la cuarta ecuación se ha agregado el término δ cuando v/c no es pequeño ya que según O' el tiempo de algún evento medido por O deberá ser corregido por un error de sincronización entre el reloj utilizado por O en el evento y el reloj utilizado por O en su origen, tal y como se estudió en el primer experimento imaginario. Habiendo dado cuenta de la sincronización se pone el factor multiplicativo γ en la cuarta ecuación para explicar la discrepancia entre los intervalos de tiempo medidos por O' y O , como se analizó ahí, el mismo factor γ debería aparecer en la primera de las (A-9) a fin de explicar la discrepancia en los intervalos de distancia medidos perpendicularmente a la dirección de movimiento relativo, se supone que sus valores no cambiaron por la transformación.

Ahora se verá si las formas supuestas en (A-9) realmente pueden transformar (A-7) en (A-8) y, de ser así, cuáles son las expresiones requeridas para δ y γ . Utilizando (A-9) para reescribir cada variable en (A-7) en términos de las variables no-primadas, se tiene

$$\gamma^2(x^2 - 2vxt + v^2t^2) + y^2 + z^2 = c^2\gamma^2(t^2 + 2\delta t + \delta^2)$$

Como de esto se debería obtener (A-8), que no contiene un término con la combinación de las variables xt , se deberá cancelar el segundo término en el paréntesis del primer miembro con algo en el segundo miembro. Obtener la cancelación para todo valor de la variable independiente t , sólo será posible con el segundo término en el paréntesis del segundo miembro. Entonces se tendrá

$$- \gamma^2 2vxt = c^2 \gamma^2 2\delta t$$

o

$$\delta = - vx/c^2$$

(A-10)

Observe que δ tiene dimensiones de tiempo y que $\delta \rightarrow 0$ si $v/c \rightarrow 0$, como se predijo antes. Una reconsideración del primer experimento imaginario hará aparente el porqué la corrección por sincronización δ es linealmente proporcional a v y a x . Factorizando x^2 y t^2 en los términos restantes después de evaluar δ^2 se obtiene

$$x^2\gamma^2(1 - v^2/c^2) + y^2 + z^2 = c^2t^2\gamma^2(1 - v^2/c^2)$$

Comparando esto con la forma requerida, (A-8) se ve que se obtendrá si

$$\gamma^2(1 - v^2/c^2) = 1$$

o

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \quad (\text{A-11})$$

Observe que γ es adimensional y que $\gamma \rightarrow 1$ si $v/c \rightarrow 0$, como ya se había predicho. Considerando los resultados de segundo experimento imaginario, no es sorprendente que γ contenga la expresión $\sqrt{1 - v^2/c^2}$. Por último se utilizan las expresiones (A-10) y (A-11) para evaluar γ y δ en (A-9) y completar con éxito la derivación de la *transformación de Lorentz*

$$\begin{aligned} x' &= \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} (x - vt) \\ y' &= y \\ z' &= z \\ t' &= \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} (t - vx/c^2) \end{aligned} \quad (\text{A-12})$$

A la transformación de los variables espacio-temporales de la relatividad se le denomina transformación de Lorentz por la razón histórica de que Lorentz había propuesto ecuaciones de la misma forma matemática (pero con un significado físico muy distinto ya que v representa una velocidad respecto al sistema del éter en vez de una velocidad de cualquier sistema inercial respecto a cualesquier otro sistema inercial) en conexión con una teoría clásica de los electrones algunos años antes del trabajo de Einstein.

Como se esperaba, la transformación de Lorentz se reduce a la transformación de Galileo cuando la velocidad relativa v , de los dos sistemas, es pequeña comparada con la velocidad de la luz c . Pero existen diferencias importantes entre las predicciones de la transformación de Galileo y la transformación de Lorentz corregida rigurosamente cuando v es comparable con c . Estas no se habían observado en la física clásica porque no se habían realizado los experimentos adecuados. Muchos resultados experimentales de la física cuántica, algunos de los cuales se analizan en este libro, muestran que efectivamente la transformación de Lorentz es la que describe adecuadamente la naturaleza. Observe que para v más grande que c las ecuaciones de la transformación de Lorentz no tienen significado ya que las coordenadas y tiempo que son reales se transforman en imaginarios. Entonces, c , parece representar el papel de una velocidad límite para todos los fenómenos físicos. Esto se entenderá mejor conforme se avance a la teoría de la relatividad.

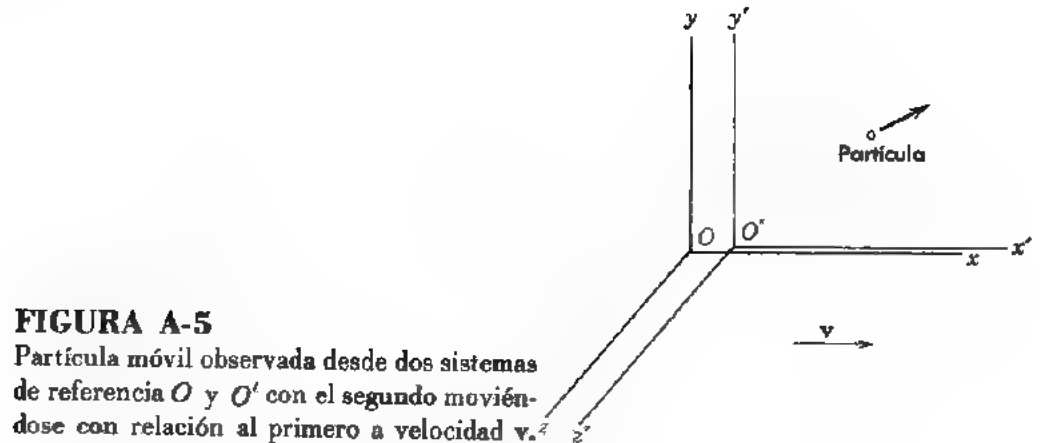
La transformación relativista de la velocidad

Considere que la partícula que se muestra en la figura A-5, se mueve con velocidad u según se mide en un sistema de referencia O .

Se desea evaluar la velocidad u' de la partícula medida en el sistema O' el cual también se mueve en relación a O con velocidad v .

Medido en el sistema O , el vector velocidad de la partícula tiene componentes

$$u_x = \frac{dx}{dt} \quad u_y = \frac{dy}{dt} \quad u_z = \frac{dz}{dt}$$

**FIGURA A-5**

Partícula móvil observada desde dos sistemas de referencia O y O' con el segundo moviéndose con relación al primero a velocidad v .

El vector velocidad, medido en el sistema O' tiene componentes

$$u'_x = \frac{dx'}{dt'}, \quad u'_y = \frac{dy'}{dt'}, \quad u'_z = \frac{dz'}{dt'}$$

Para establecer las relaciones requeridas se toman las diferenciales de la transformación de Lorentz (A-12) recordando que v es constante. Esto conduce a

$$\begin{aligned} dx' &= \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} (dx - v dt) \\ dy' &= dy \\ dz' &= dz \\ dt' &= \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} (dt - v dx/c^2) \end{aligned}$$

Así se obtiene

$$\begin{aligned} u'_x = \frac{dx'}{dt'} &= \frac{\frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} (dx - v dt)}{\frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} (dt - \frac{v dx}{c^2})} = \frac{\frac{dx}{dt} - v}{1 - \frac{v}{c^2} \frac{dx}{dt}} = \frac{u_x - v}{1 - \frac{vu_x}{c^2}} \\ u'_y = \frac{dy'}{dt'} &= \frac{dy}{\frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} (dt - \frac{v dx}{c^2})} = \frac{\frac{dy}{dt}}{\frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} (1 - \frac{v^2 dx}{c^2 dt})} = \frac{\sqrt{1 - v^2/c^2} u_y}{1 - \frac{vu_x}{c^2}} \\ u'_z = \frac{dz'}{dt'} &= \frac{dz}{\frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} (dt - \frac{v dx}{c^2})} = \frac{\frac{dz}{dt}}{\frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} (1 - \frac{v^2 dx}{c^2 dt})} = \frac{\sqrt{1 - v^2/c^2} u_z}{1 - \frac{vu_x}{c^2}} \end{aligned} \quad (\text{A-13})$$

Estas ecuaciones constituyen la transformación relativista para la velocidad.

Nótese que conforme v/c se aproxima a cero (A-13) se aproxima a lo que se obtendría de la transformación de Galileo. Otra propiedad interesante es que es imposible escoger u y v tales que u' , la magnitud de la velocidad medida en el nuevo sistema, sea mayor que c . Considere el ejemplo ilustrado en la figura A-6. Según O , la partícula 1 tiene velocidad $0.8c$ en la dirección positiva de las x y la partícula 2 tiene velocidad $0.9c$ en la dirección negativa de x . Se evalúa la velocidad de la partícula medida en un sistema O' que se mueve en la partícula

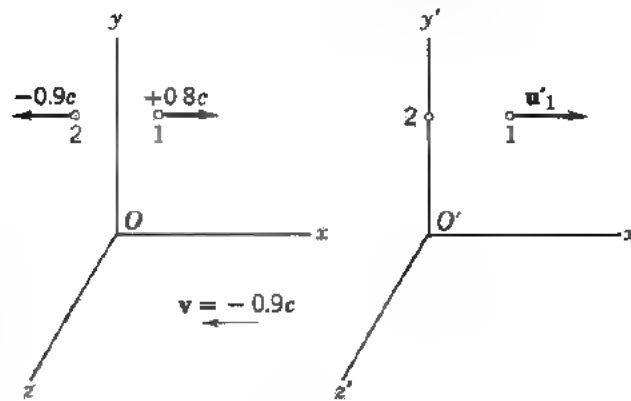
**FIGURA A-6**

Ilustración de un ejemplo de adición relativista de velocidades

utilizando la primera de las (A-13) con $u_x = u_1 = 0.8c$ y $v = -0.9c$. Se obtiene

$$u'_1 = \frac{0.8c - (-0.9c)}{1 - \frac{(-0.9c)(0.8c)}{c^2}} = \frac{1.70c}{1.72} = 0.99c$$

Las ecuaciones de transformación de la velocidad demuestran otro aspecto del hecho de que c actúa como velocidad límite para todos los fenómenos de la física.

Masa relativista

Se ha destacado que la modificación de Einstein de las ecuaciones de transformación necesitará algunas modificaciones de compensación en las ecuaciones de la mecánica, de modo que éstas continúen satisfaciendo los requisitos de no cambiar de forma en una transformación de un sistema inercial a otro que se mueve con relación al primero. Ahora se empezará a desarrollar la nueva mecánica, a la que se le denomina *mecánica relativista*.

Es evidente que es deseable llevar a la mecánica relativista tanto cuanto lo permitan las circunstancias de la mecánica clásica. Se verá que es posible preservar las ecuaciones de Newton del movimiento en una forma equivalente a la dada originalmente por Newton

$$\mathbf{F} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} \quad (\text{A-14})$$

donde \mathbf{p} es el impulso de la partícula afectada por la fuerza \mathbf{F} . También es posible preservar la ley clásica íntimamente relacionada referente a la conservación del impulso de las partículas en un sistema aislado.

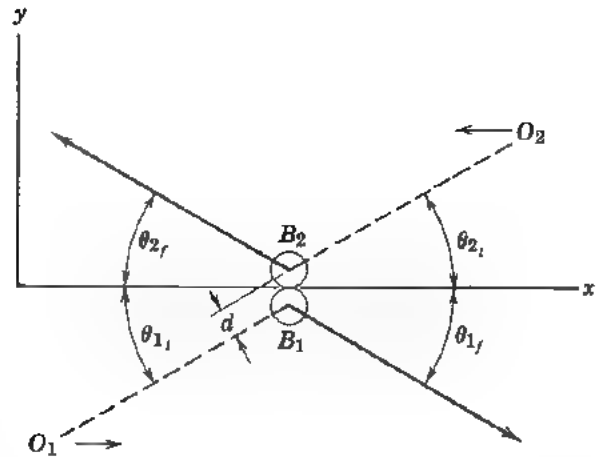
$$\left[\sum_{\text{todas las partículas}} \mathbf{p} \right]_{\text{inicial}} = \left[\sum_{\text{todas las partículas}} \mathbf{p} \right]_{\text{final}} \quad (\text{A-15})$$

También será posible preservar la definición clásica del impulso de una partícula

$$\mathbf{p} = m\mathbf{v} \quad (\text{A-16})$$

donde m es su masa y \mathbf{v} su velocidad. Pero para hacer todo esto, será necesario permitir que la masa de una partícula sea función de la magnitud de su velocidad.

$$m = m(v) \quad (\text{A-17})$$

**FIGURA A-7**

Colisión simétrica entre dos bolas de masa en reposo idéntica.

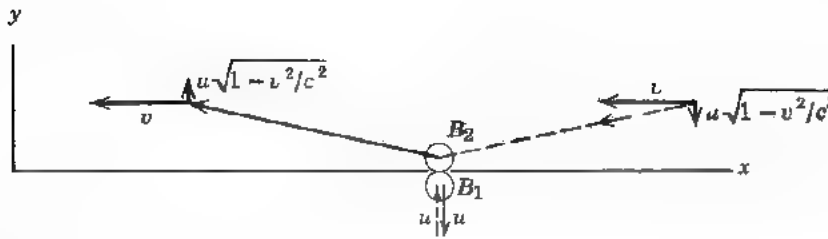
La forma de esta función está por determinarse. Sin embargo, *a priori* se sabe que habrá de tenerse $m(v) = m_0$ si $v/c \ll 1$, donde la constante m_0 es la masa de la partícula medida clásicamente. La razón es que cuando una velocidad característica se hace mucho menor que la velocidad de la luz, la transformación de Lorentz en cuestión se aproxima a la transformación de Galileo y no se necesita modificar la mecánica.

Para evaluar la función $m(v)$, considere el siguiente experimento imaginario. Según se mide en el sistema x, y, z, t de la figura A-7, los observadores O_1 y O_2 se mueven en direcciones paralelas al eje de las x con velocidades de magnitud igual pero direcciones opuestas. Estos observadores tienen partículas idénticas, por ejemplo, bolas de billar B_1 y B_2 , de masa m_0 , medida cuando ellas están en reposo. Al pasar, cada uno lanza su bola para pegarle a la otra y lo hacen con una velocidad, que según su punto de vista, está en dirección perpendicular al eje de las x y tiene magnitud u .

Según se observa en el sistema x, y, z, t , B_1 y B_2 se aproximarían por caminos paralelos haciendo ángulos $\theta_{1i} = \theta_{2i}$ con el eje x y rebotando por trayectorias a ángulos θ_{1f} y θ_{2f} respecto al mismo eje. Suponiendo la conservación del impulso y que la colisión es elástica, es fácil demostrar que $\theta_{1f} = \theta_{2f}$ y que la magnitud de la velocidad de las bolas es la misma después y antes de la colisión. El valor real de θ_{1f} y θ_{2f} como se muestra en la figura.

Ahora considere el proceso desde el punto de vista de O_1 tal como se muestra en la figura A-8. O_1 lanza B_1 a lo largo de una línea paralela a su eje y con velocidad de magnitud u la que se tomará muy pequeña comparada con c . Esta regresa a lo largo de la misma línea con velocidad de la misma magnitud pero signo opuesto. El observa que B_2 mantiene una componente x de la velocidad justamente igual a v que es la velocidad de O_2 relativa a O_1 que se considerará comparable a c . Según observa O_1 la componente de la velocidad de B_2 que está a lo largo de su eje y cambia de signo durante la colisión pero mantiene constante su magnitud. Para evaluar esta magnitud se supone que la componente y de la velocidad de B_2 medida por O_2 es u , a continuación, se transforma esto al sistema de O_1 con ayuda de la segunda de las (A-13) y se obtiene $u\sqrt{1 - v^2/c^2}$ para la magnitud de la componente y de la velocidad de B_2 medida por O_1 .

Los impulsos y de B_1 y B_2 medidos en el sistema O_1 simplemente cambian de signo durante la colisión. Consecuentemente, el impulso total y del sistema aislado de dos bolas que chocan cambia de signo. Si la ley de conservación del impulso (A-15) es válida, el impulso total y antes de la colisión será igual al

**FIGURA A-8**

Colisión simétrica observada por O_1 . Puesto que se supone a u muy pequeña comparada con v , el ángulo entre las trayectorias de B_2 y el eje x es en realidad mucho menor que el que se muestra.

impulso y después de la colisión. Esto sólo puede ser cierto si el total de la componente y del impulso del sistema medido por O_1 es cero antes de la colisión. Evaluando los componentes y del impulso, como las masas por la componente y de la velocidad según la definición de (A-16) e igualando su suma a cero, se obtiene una ecuación que obviamente es contradictoria en sí misma si se insiste en que ambas masas tengan el valor m_0 que se les midió en sistemas en los cuales estos estaban en reposo. La razón es que según O_1 la magnitud de la componente y de la velocidad de B_1 es u , mientras que la magnitud de la componente y de la velocidad de B_2 es $u\sqrt{1-v^2/c^2}$.

Sin embargo, si se permite que la masa de una partícula sea función de la magnitud de su vector velocidad total, se puede satisfacer la ley de la conservación del impulso. Puesto que u es muy pequeña comparada con v , la magnitud del vector velocidad de B_2 medido por O_1 es esencialmente v , como se puede ver en la figura A-8. La magnitud del vector velocidad de B_1 de acuerdo con O_1 es justamente u . Entonces O_1 escribiría la ley de conservación del impulso para la componente y como

$$m(u)u - m(v)u\sqrt{1-v^2/c^2} = 0$$

o

$$m(u) = m(v)\sqrt{1-v^2/c^2}$$

Ya que u es muy pequeña comparada con c , se deberá tomar $m(u) = m_0$ y obtener

$$m(v) = \frac{1}{\sqrt{1-v^2/c^2}} m_0 \quad (\text{A-18})$$

Una teoría de la mecánica relativista consistente con la conservación del impulso requiere que la masa $m(v)$ de una partícula medida cuando ésta se mueve con velocidad de magnitud v sea mayor que su masa m_0 medida cuando está en reposo por el factor $1/\sqrt{1-v^2/c^2}$. La masa $m(v)$ se llama la *masa relativista* de la partícula y m_0 la *masa en reposo*. Una reconsideración de estos argumentos mostrará que los dos observadores en el experimento pensado miden diferentes valores de la masa de la partícula debido a la diferencia en sus mediciones de sus componentes de la velocidad, perpendiculares a la dirección de su movimiento relativo y que surge debido a la diferencia en sus medidas de los intervalos de tiempo.

Energía relativista

Considere una partícula de masa en reposo m_0 estacionaria inicialmente en $x = 0$. Entonces se le aplica en la dirección x positiva una fuerza de magnitud F y la partícula se mueve bajo la influencia de la fuerza. Es interesante calcular el trabajo total hecho por la fuerza cuando la partícula se mueve a $x = x_f$. Este trabajo se denotará por K . Tomando la definición usual de trabajo

$$K = \int_0^{x_f} F dx = \int_0^{t_f} F \frac{dx}{dt} dt = \int_0^{t_f} Fv dt$$

donde t_f es el instante en el que la partícula llega a x_f . Para evaluar la integral se deberá conocer la forma relativista de las ecuaciones de Newton del movimiento. Con una expresión para el impulso relativísticamente aceptable $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ donde m es la masa relativista, se puede tomar la ecuación de Newton relativista en la forma (A-14)

$$\mathbf{F} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} = \frac{d(m\mathbf{v})}{dt}$$

Esto es esencialmente una definición de la fuerza \mathbf{F} . Utilizándola para evaluar \mathbf{F} en la integral, se tiene

$$K = \int_0^{t_f} v \frac{dp}{dt} dt = \int_0^{v_f} v dp$$

Integrando por partes, se obtiene

$$K = [vp]_0^{v_f} - \int_0^{v_f} p dv$$

Evaluando la m en $p = mv$ de (A-18) y expresando $v dv$ como $d(v^2)/2$, se tiene

$$K = \left[\frac{m_0 v^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \right]_0^{v_f} - \frac{m_0}{2} \int_0^{v_f} \frac{d(v^2)}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

La integral es una forma estándar que conduce a

$$K = m_0 c^2 \left[\frac{v^2/c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} + \sqrt{1 - v^2/c^2} \right]_0^{v_f}$$

que se reduce a

$$K = m_0 c^2 \left[\frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \right]_0^{v_f}$$

Evaluando los límites y eliminando el subíndice f para simplificar la notación se tiene

$$K = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} - m_0 c^2 \quad (\text{A-19})$$

Ahora, la ley clásica de la conservación de la energía implica que el trabajo total hecho por la fuerza que actúa sobre la partícula deberá de ser igual a su energía cinética. Se llamará K a la energía cinética de la partícula. Para comprobar en el límite clásico se toma $v/c \ll 1$ y se desarrolla el recíproco de la raíz cuadrada, para obtener

$$K = m_0 c^2 \left[\left(1 - \frac{v^2}{c^2} \right)^{-1/2} - 1 \right] \simeq m_0 c^2 \left[1 + \frac{1}{2} \frac{v^2}{c^2} - 1 \right]$$

o

$$K \simeq \frac{m_0 c^2}{2} \frac{v^2}{c^2} = \frac{m_0 v^2}{2}$$

Esto concuerda con la expresión clásica para la energía cinética y confirma la identificación de K en (A-19) como la *energía cinética relativista*.

Continuando la interpretación de (A-19), se observa que K es una función de v que se puede escribir como la diferencia entre un término que depende de v y un término constante, si

$$K(v) = E(v) - E(0)$$

donde $E(v) = m_0 c^2 / \sqrt{1 - v^2/c^2} = mc^2$ con m la masa relativista y donde $E(0)$ es el valor de $E(v)$ para $v = 0$ es decir, $E(0) = m_0 c^2$. Puesto que K es una energía, $E(v)$ y $E(0)$ también serán energías - siendo $E(v)$ alguna energía asociada con la partícula cuando su velocidad es v y $E(0)$ alguna energía asociada con la partícula cuando su velocidad es 0. Para identificar estas energías, se vuelve a escribir la ecuación como

$$E(v) = K(v) + E(0)$$

La conclusión es evidente. Se deberá interpretar $E(v)$ como la energía total de la partícula que se mueve con velocidad v , ya que es la suma de la energía cinética $K(v)$ de la partícula y una energía intrínseca $E(0)$ asociada con la partícula cuando ésta está en reposo. La energía $E(v)$ se llama la *energía relativista total* y $E(0)$ la *energía de la masa en reposo*.

Se ha establecido la bien conocida relación de Einstein entre la masa y la energía: *La energía de la masa en reposo $E(0)$ de una partícula es c^2 veces su masa en reposo m_0 .*

$$E(0) = m_0 c^2 \quad (\text{A-20})$$

y la *energía relativista total E de una partícula es c^2 veces su masa relativista m*

$$E = mc^2 \quad (\text{A-21})$$

La ecuación (A-19) informa sobre la relación entre la energía relativista total E , la energía cinética relativista K , y la energía de masa en reposo $m_0 c^2$

$$E = K + m_0 c^2 \quad (\text{A-22})$$

Es conveniente tener una expresión para la energía total relativista que contenga explícitamente al impulso p . Lo que se puede obtener evaluando la cantidad

$$m^2 c^4 - m_0^2 c^4 = m_0^2 c^4 \left(\frac{1}{1 - v^2/c^2} - 1 \right) = m_0^2 c^4 \frac{v^2/c^2}{1 - v^2/c^2}$$

Entonces

$$= \frac{m_0^2 c^2 v^2}{1 - v^2/c^2} = c^2 m^2 v^2 = c^2 p^2$$

o

$$m^2 c^4 = c^2 p^2 + m_0^2 c^4$$

$$E^2 = c^2 p^2 + m_0^2 c^4 \quad (\text{A-23})$$

No obstante que las selecciones hechas en la teoría de la mecánica relativista parecen razonables, su justificación última se encuentra al comparar las predicciones de la teoría con los experimentos apropiados. En este libro se presentarán varias comparaciones muy exitosas, pero aquí es apropiado apuntar que la existencia de una energía de masa en reposo $m_0 c^2$ no contradice la física clásica.

Puesto que en este campo todos los experimentos tratan con sistemas en los que la masa en reposo total es esencialmente constante, las energías de masa en reposo apropiadas se pueden sumar en ambos miembros de las ecuaciones de energía clásica sin destruir su validez.

Sin embargo, la teoría es de mayor interés que el académico puesto que existen procesos naturales importantes en los cuales la masa en reposo total de un sistema aislado cambia de manera significativa. Para esos procesos, los experimentos de la física cuántica muestran que el cambio en la energía de la masa en reposo es exactamente compensada por un cambio en la energía cinética, de tal manera que se conserve la energía relativista total del sistema. Esto es, por supuesto, lo que sucede en un reactor nuclear. Consecuentemente, en la relatividad habrán de substituirse las leyes clásicas de conservación de masa y energía por una sola ley de *conservación de la energía relativista total*:

Medido en un sistema de referencia dado, la energía relativista total de un sistema aislado permanece constante.

Se finaliza con este desarrollo breve de la relatividad, estableciendo que cálculos explícitos demuestran que ni la ecuación de Newton expresada en (A-14), ni las ecuaciones de Maxwell cambian de forma ante una transformación de Lorentz de un sistema de referencia a otro que se mueve en relación al primero. Sin embargo, estos cálculos demuestran que la fuerza en el caso de la ecuación mecánica y los campos eléctrico y magnético en el caso de las ecuaciones electromagnéticas, cambian ante una transformación de Lorentz de un sistema a otro. Aunque esto no se verá aquí, se recomienda al estudiante que lo estudie en cualquier otra parte con el fin de que tenga una visión más general, particularmente de las relaciones entre los campos eléctrico y magnético. Véase el apéndice L.

Radiación por una carga acelerada

Aquí se da una visión cualitativa de la teoría clásica de la emisión de radiación electromagnética por una carga acelerada, restringiéndose al caso de una carga estacionaria en el vacío que se la acelera bruscamente hasta una velocidad no relativista $v \ll c$.

Se sabe que una carga estacionaria tiene un campo eléctrico estático E asociado, cuya energía por unidad de volumen está dada por

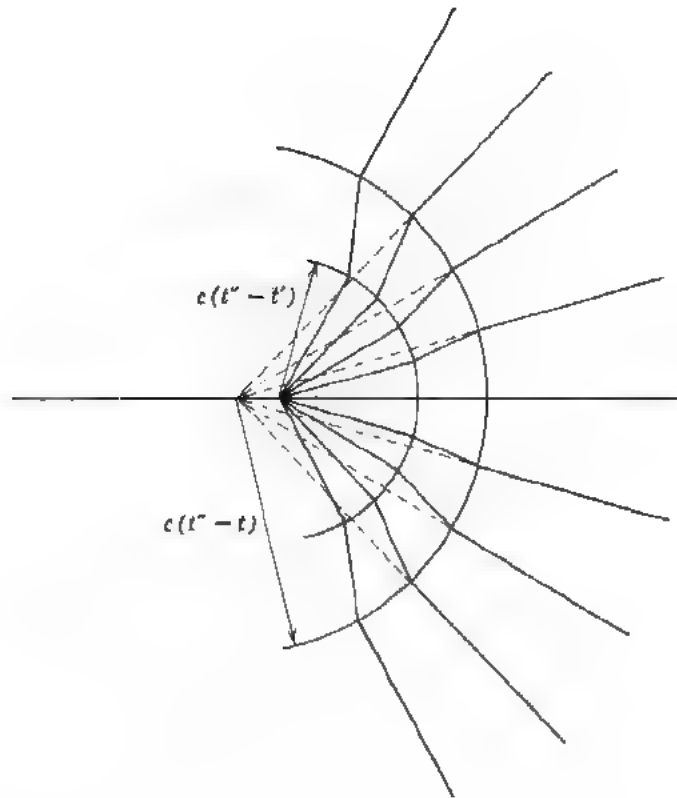
$$\rho = \frac{1}{2} \epsilon_0 E^2 \quad (\text{B-1})$$

Esta energía está almacenada en el campo y no es radiada. Si la carga se mueve con una velocidad uniforme, existe un campo magnético B asociado a ella así como un campo eléctrico. La energía total almacenada en el campo no estático de una carga que se mueve uniformemente, es mayor que la del campo estático de una carga estacionaria, la energía adicional proviene del trabajo hecho por las fuerzas que inicialmente producen el movimiento de la carga. En este caso, la densidad de energía está dada por

$$\rho = \frac{1}{2} \epsilon_0 E^2 + \frac{1}{2\mu_0} B^2 \quad (\text{B-2})$$

y la energía almacenada en el campo se mueve con la carga. Que en este caso no se radia energía aun en este caso, se sigue de transformar a un sistema de referencia en el cual la carga está estacionaria y de aplicar el requisito relativista de que el comportamiento de la carga, incluyendo el que radie o no, no puede depender del sistema de referencia desde el que se observa. Por lo tanto, para una carga que tiene velocidad constante, los campos eléctrico y magnético son capaces de ajustarse entre ellos de tal manera que no radie energía, a pesar de que estos campos no sean estáticos.

Sin embargo, para una carga acelerada los campos eléctrico y magnético no estáticos no pueden ajustarse entre si de modo tal, que no se radie nada de la energía almacenada. Esto se puede entender cualitativamente considerando el comportamiento del campo eléctrico. En la figura B-1 se describe este campo mediante el esquema de algunas de las líneas de fuerza que circundan una carga que se encontraba en reposo al instante inicial t y sufre una aceleración constante hacia la derecha durante el intervalo t a t' para continuar mo-

**FIGURA B-1**

Líneas de fuerza que circundan una carga acelerada. Sólo se muestran algunas de las líneas.

viéndose con velocidad final constante. La figura muestra las líneas de fuerza para algún instante posterior t'' visto desde un sistema de referencia que se mueve a la velocidad v . Para distancias pequeñas las líneas de fuerza están dirigidas radialmente hacia afuera desde la posición real de la carga. Para distancias grandes las líneas nacen desde donde el campo se anticiparía si la carga no estuviera acelerada. La razón es que la información sobre la posición de la carga no puede transmitirse a puntos lejanos con velocidad infinita, sino solamente con velocidad c . Como resultado de esto, aparecen quiebres en la línea de fuerza localizadas entre una esfera centrada en la posición anticipada y de radio $c(t'' - t)$ que es la mínima distancia a la cual el campo puede "saber" que empezó la aceleración, y una esfera centrada en la posición real y de radio $c(t'' - t')$ que es la distancia mínima a la cual el campo puede "saber" que cesó la aceleración. Conforme aumenta t'' la región que contiene los quiebres se expande hacia afuera con velocidad c . Es decir, cada quiebre de ajuste se propaga a lo largo de su línea de fuerza de la misma manera que se propaga un quiebre generado en el extremo de una cuerda tensa. En la región que contiene los quiebres el campo eléctrico tiene componentes tanto longitudinales como transversales a la dirección de expansión. Pero construyendo diagramas para varios valores de t'' es fácil ver que la componente longitudinal muere muy rápidamente y puede ignorarse de inmediato, mientras que la componente transversal muere lentamente. De hecho, la teoría electromagnética muestra, por cálculos basados en la misma idea de este estudio cualitativo, que a distancias grandes de la región de la aceleración (t'' grandes) el campo eléctrico transversal está sujeto a la ecuación

$$E_{\perp} = \frac{qa}{4\pi\epsilon_0 c^2 r} \sin \theta \quad (\text{B-3})$$

En esta ecuación, que es válida sólo si $v/c \ll 1$, $r = c(t'' - t)$ es la magnitud del vector \mathbf{r} de la región en la cual la aceleración \mathbf{a} tiene lugar al punto en el cual se evalúa el campo transversal y θ es el ángulo entre \mathbf{r} y \mathbf{a} . La dependencia de E_{\perp} con θ y r se puede ver de la figura B-1 y diagramas comparables para valores grandes de t'' y será claro de este estudio que E_{\perp} deberá ser proporcional a q y a . Similarmente, existe un campo magnético transversal que se mueve a lo largo de E_{\perp} si $v/c \ll 1$ para distancias grandes desde la región de la aceleración su intensidad está dada por

$$B_{\perp} = \frac{\mu_0 q a}{4\pi c r} \sin \theta \quad (\text{B-4})$$

Estos dos campos transversales provenientes de la radiación electromagnética emitida por la carga acelerada se propagan hacia afuera con velocidad c . El campo radiado está polarizado con \mathbf{E} en el plano de \mathbf{a} y \mathbf{r} con \mathbf{B} en ángulo recto con este plano. La densidad de energía de la radiación es

$$\rho = \frac{1}{2} \epsilon_0 E_{\perp}^2 + \frac{1}{2} \frac{B_{\perp}^2}{\mu_0}$$

o con $c = 1/\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}$ así que $B_{\perp} = E_{\perp}/c$

$$\rho = \frac{1}{2} \epsilon_0 E_{\perp}^2 + \frac{1}{2} \epsilon_0 E_{\perp}^2 = \epsilon_0 E_{\perp}^2 \quad (\text{B-5})$$

El "vector de Poynting" que da el flujo de energía por unidad de área (es decir, la densidad de radiación) está dirigido a lo largo de \mathbf{r} y tiene magnitud

$$S = \rho c = \epsilon_0 c E_{\perp}^2$$

Por lo tanto, de (B-3)

$$S = \frac{q^2 a^2}{16\pi^2 \epsilon_0 c^3 r^2} \sin^2 \theta \quad (\text{B-6})$$

que se puede obtener también de la relación que define el vector de Poynting

$$\mathbf{S} = \frac{1}{\mu_0} \mathbf{E} \times \mathbf{B}$$

Obsérvese que no se emite energía hacia adelante o hacia atrás de la dirección de la aceleración ($\theta = 0^\circ$ o 180°) y que la energía emitida es un máximo a ángulo recto de esta dirección ($\theta = 90^\circ$ o 270°). La energía radiada está distribuida simétricamente alrededor de la línea del movimiento acelerado y respecto a las direcciones hacia adelante y hacia atrás. De (B-6) también se ve que la intensidad radiada está sujeta a la ley familiar del inverso del cuadrado $S \propto 1/r^2$. Para obtener la razón R a la cual se radia la energía total en todas direcciones por unidad de tiempo, es decir, la potencia, integramos S sobre el área de una esfera de radio arbitrario r . Esto es

$$R = \int S(\theta) dA = \int_0^\pi S(\theta) 2\pi r^2 \sin \theta d\theta$$

donde $dA = 2\pi r^2 \sin \theta d\theta$ es el elemento diferencial anular de área de la esfera en un intervalo entre θ y $\theta + d\theta$. Realizando la integración se obtiene

$$R = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2}{3} \frac{q^2 a^2}{c^3} \quad (\text{B-7})$$

que es la razón de radiación de energía por la carga acelerada. Se puede observar que la razón de radiación es proporcional al cuadrado de la aceleración.

Deberá observarse que la energía deberá suministrarse para mantener una aceleración lineal constante de la carga, parte de ella simplemente para compensar la energía radiada. Sin embargo, la energía perdida es usualmente despreciable para velocidades no relativistas. En el caso de desaceleración la energía radiada es suministrada por la energía almacenada en el campo electromagnético de la carga cuya velocidad decrece. Esta es la radiación de bremsstrahlung estudiada en el capítulo 2.

Frecuentemente se aplica (B-7) a un dipolo eléctrico vibrante. Sea q una carga que vibra alrededor del origen del eje x con movimiento armónico simple. Entonces, el desplazamiento de la carga como función del tiempo es $x = A \sin \omega t$ donde A es la amplitud de la vibración y $\omega = 2\pi\nu$ es la frecuencia angular. La aceleración de la carga está dada por $a = d^2x/dt^2 = -\omega^2 A \sin \omega t = -\omega^2 x$. Si se substituye esta expresión por a en (B-7) se obtiene

$$R = \frac{2q^2\omega^4x^2}{4\pi\epsilon_03c^3} \quad (\text{B-8})$$

Ya que x varía en el tiempo, la potencia radiada también varía con el tiempo con la misma frecuencia que la vibración del dipolo. Sin embargo, el valor promedio de $x^2 = A^2 \sin^2 \omega t$ sobre un periodo de vibración, es simplemente $A^2/2$ así que la razón promedio de radiación está dada por

$$\bar{R} = \frac{q^2\omega^4A^2}{4\pi\epsilon_03c^3}$$

o con $\omega = 2\pi\nu$

$$\bar{R} = \frac{16\pi^4\nu^4q^2A^2}{4\pi\epsilon_03c^3} \quad (\text{B-9})$$

Ahora, qx es el momento dipolar eléctrico del dipolo vibrante cuando la carga está en x . Así, qA es la amplitud del momento dipolar eléctrico. Escribiendo $qA = p$ se tiene la expresión usual

$$\bar{R} = \frac{4\pi^2\nu^4p^2}{3\epsilon_0c^3} \quad (\text{B-10})$$

Distribución de Boltzmann

Aquí se presenta un argumento numérico simple que conduce a una aproximación de la distribución de Boltzmann y a continuación un argumento general aun más simple que verifica la forma exacta de la distribución. Considérese un sistema que contiene un gran número de entidades físicas del mismo tipo y que están en equilibrio térmico a temperatura T . Para estar en equilibrio deben ser capaces de intercambiar energía entre ellas. En el intercambio de energías habrá fluctuaciones y, en algunas ocasiones, algunas tendrán más que la energía promedio y otras tendrán menos. Sin embargo, la teoría clásica de la mecánica estadística requiere que estas energías ϵ se distribuyan según una distribución probabilística definida, cuya forma está especificada por T . Una razón es que el valor promedio $\bar{\epsilon}$ de la energía de cada entidad está determinado por la distribución de probabilidad y $\bar{\epsilon}$ deberá tener un valor definido para una T particular.

Para mostrar estas ideas, considere un sistema que consiste de entidades del mismo tipo y que pueden contener energía. Un ejemplo sería un conjunto de resortes idénticos, cada uno de los cuales contiene energía si su longitud está vibrando. Suponga que el sistema está aislado de lo que lo rodea de modo que la energía total es constante y suponga también que las entidades pueden intercambiar energía entre ellas mediante algún mecanismo, de tal manera que cada uno de los constituyentes del sistema pueden entrar en equilibrio térmico con el resto. Con el objeto de simplificar los cálculos subsecuentes, supóngase también por el momento que la energía de cualquier ente está restringida a uno de los valores $\epsilon = 0, \Delta\epsilon, 2\Delta\epsilon, 3\Delta\epsilon, 4\Delta\epsilon, \dots$. Posteriormente se hará que el intervalo $\Delta\epsilon$ tienda a cero, de modo que todos los valores de ϵ sean permitidos. Para mayor simplicidad se considerará primero que solamente existen cuatro (un número elegido pequeño arbitrariamente) entidades en el sistema y que la energía total de éste tiene el valor $3\Delta\epsilon$ (que también se escoge pequeño arbitrariamente dentro de los múltiplos enteros que $\Delta\epsilon$ puede tomar). Posteriormente, se generaliza a sistemas con un número grande de entes y cualquier energía total.

Ya que los cuatro entes pueden intercambiar energía entre sí, todas las divisiones de la energía total $3\Delta\epsilon$ a los cuatro entes son posibles. En la figura C-1 se muestran todas las divisiones posibles que se han marcado con la letra i . Para $i=1$ tres entes tienen $\epsilon=0$ y la cuarta tiene $\epsilon=3\Delta\epsilon$ dando así la energía total requerida $3\Delta\epsilon$. En realidad, existen cuatro formas diferentes de lograr esta división ya que cualquiera de las cuatro puede ser la que está en el

Marca de las divisiones	$\mathcal{E} = 0$	$\mathcal{E} = \Delta\mathcal{E}$	$\mathcal{E} = 2\Delta\mathcal{E}$	$\mathcal{E} = 3\Delta\mathcal{E}$	$\mathcal{E} = 4\Delta\mathcal{E}$	Número duplicado de divisiones distinguibles	P_i
$i = 1$	✓✓✓			✓		4	4/20
$i = 2$	✓✓	✓	✓			12	12/20
$i = 3$	✓	✓✓✓				4	4/20
$n'(\mathcal{E})$	40/20	24/20	12/20	4/20	0/20		

FIGURA C-1

Ilustración de un cálculo simple que conduce a una aproximación a la distribución de Boltzmann

estado de energía $\mathcal{E} = 3\Delta\mathcal{E}$. En la figura esto se indica en la columna marcada "número de divisiones duplicados distinguibles". Un segundo tipo de división posible, marcando $i = 2$ es una en la cual dos entes tienen $\mathcal{E} = 0$ el tercero $\mathcal{E} = \Delta\mathcal{E}$ y el cuarto $\mathcal{E} = 2\Delta\mathcal{E}$. En este caso existen doce divisiones duplicadas. La tercera división posible, marcada $i = 3$ tiene también cuatro modos duplicados de contar con un ente con $\mathcal{E} = 0$ y los otros tres con $\mathcal{E} = \Delta\mathcal{E}$ dando la energía total requerida $3\Delta\mathcal{E}$.

Al evaluar el número de divisiones duplicadas se cuentan como duplicados distinguibles cualquier arreglo de entes entre diferentes estados de energía. Sin embargo, cualquier rearrreglo de entes en el mismo estado de energía no se cuenta como duplicado, ya que entes del mismo tipo y que tengan la misma energía no pueden ser distinguibles experimentalmente uno de otro. Esto es, *entes idénticos se tratan como si fueran distinguibles, excepto para rearrreglos dentro del mismo estado de energía*. El número total de rearrreglos (permutaciones) de los cuatro entes es $4! \equiv 4 \times 3 \times 2 \times 1$. (El número de formas diferentes de ordenar cuatro objetos es $4!$, ya que existen cuatro oportunidades de escoger cual de ellos se toma primero, tres oportunidades para escoger el segundo de los tres restantes, dos para tomar el siguiente y sólo una para el último. El número total de oportunidades es $4 \times 3 \times 2 \times 1 \equiv 4!$. Para n objetos el número de ordenamientos diferentes es $n! \equiv n(n-1)(n-2) \cdots 1$). Pero los rearrreglos dentro del mismo estado de energía no cuentan. Entonces, por ejemplo, en el caso $i = 2$ el número de divisiones duplicados distinguibles se reduce de $4!$ a $4!/2! = 12$ ya que existen $2!$ rearrreglos en el estado $\mathcal{E} = 0$ que no cuentan como distinguibles. En los casos $i = 1$ o $i = 3$ el número de esas divisiones se reducen de $4!$ a $4!/3! = 4$ ya que existen $3!$ rearrreglos dentro del estado $\mathcal{E} = 0$ o el estado $\mathcal{E} = \Delta\mathcal{E}$ que no cuentan como distinguibles.

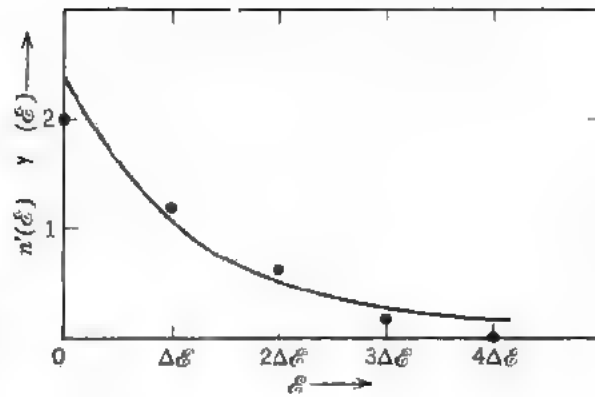


FIGURA C-2

Comparación de los resultados de un cálculo simple y la distribución de Boltzmann.

Ahora se hará la suposición final: *todas las divisiones posibles de la energía del sistema ocurren con la misma probabilidad*. Por lo tanto la probabilidad de que las divisiones de un tipo (o marca) dado ocurran, es proporcional al número de divisiones duplicadas distinguibles de este tipo. La probabilidad relativa, P_i , es justamente igual a este número dividido entre el número total de esas divisiones. En la figura C-1 se enlistan las probabilidades relativas en la columna marcada P_i .

A continuación, se calculará $n'(\epsilon)$ que es el número probable de entes en el estado de energía ϵ . Considérese el estado de energía $\epsilon = 0$. Para las divisiones del tipo $i = 1$ existen tres entes en este estado y la probabilidad relativa P_i de que ocurran estas divisiones es $4/20$; para $i = 2$ existen dos entes en este estado y P_i es $12/20$; para $i = 3$ existe un ente, y P_i es $4/20$. Entonces $n'(0)$ el número probable de entes en el estado $\epsilon = 0$, es $3 \times (4/20) + 2 \times (12/20) + 1 \times (4/20) = 40/20$. Los valores de $n'(\epsilon)$ calculados en la misma forma para los otros valores de ϵ se enlistan en la parte inferior de la figura C-1 y se denotan por $n'(\epsilon)$. (Obsérvese que la suma de estos números es cuatro, por lo tanto, se encuentra un total correcto de cuatro entes en todos los estados). En la figura C-2 también se han graficado como puntos, los valores de $n'(\epsilon)$. La curva sólida en la figura C-2 es la función exponencial decreciente

$$n(\epsilon) = Ae^{-\epsilon/\epsilon_0} \quad (C-1)$$

donde A y ϵ_0 son constantes que se han ajustado por dar el mejor llenado de la curva con los puntos que representan los resultados de estos cálculos. La rápida caída en $n'(\epsilon)$ con el incremento de ϵ refleja el hecho de que, si un ente toma una gran parte de la energía total del sistema el resto del sistema tendrá necesariamente una energía reducida y, por lo tanto, un número considerablemente reducido de modos de dividir esa energía entre sus partes constitutivas. Esto es, existen muy pocas divisiones de la energía total del sistema en situaciones en las que una parte relativamente grande de la energía está concentrada en un ente.

Imagine ahora que se hace $\Delta\epsilon$ más y más pequeña sucesivamente, incrementando el número de estados permitidos al mismo tiempo que se mantiene la energía total en su valor previo. El resultado de este proceso es que la función $n'(\epsilon)$ calculada resulta definida para valores de ϵ que están más y más próximos entre sí. (Esto es, se tendrán más puntos en nuestra distribución). En el límite $\Delta\epsilon \rightarrow 0$ la energía de un ente se hace una variable continua, como lo demanda la física clásica y la distribución $n'(\epsilon)$ se hace una función continua. Por último, si se permite que el número de entes en el

sistema sea grande, se encuentra que esta función es idéntica con la exponencial decreciente $n(\epsilon)$ de (C-1). (Esto es, conforme los puntos se hacen más y más próximos no se apartan de la exponencial decreciente sino que caen justamente en ella). El verificar esto mediante una extensión directa de estos cálculos al caso de un número muy grande de estados de energía y entes, involucra una contabilidad formidable para enumerar las divisiones distinguibles que tienen los valores requeridos de la energía total y el número de entes y a continuación calcular las muchas probabilidades relativas. Se verificará la validez de la distribución de la probabilidad dada en (C-1) mediante un procedimiento más sutil pero muy simple.

Considere un sistema de muchos entes idénticos en equilibrio térmico entre ellos, encerrado en paredes que lo aíslan de sus alrededores. El equilibrio requiere que los entes sean capaces de intercambiar energía. Por ejemplo, al interactuar con las paredes del sistema, los entes pueden intercambiar energía con las paredes y así indirectamente intercambiar energía con cada una de las otras. Entonces, si al interactuar con los otros entes, uno gana energía, lo hace a expensas de la energía del resto del sistema (todos los otros entes más las paredes). Excepto por esta restricción de la conservación de la energía los entes son independientes entre sí. *La presencia de un ente en algún estado de energía en particular no inhibe o favorece en ninguna forma la oportunidad de que otro ente idéntico esté en ese estado.* Considere ahora dos de estos entes. Sea $P(\epsilon_1)$ la probabilidad de encontrar a uno de ellos en un estado de energía ϵ_1 . Entonces la probabilidad de encontrar al otro en un estado de energía ϵ_2 estará dada por la misma función de distribución de probabilidad, ya que los entes tienen propiedades idénticas, pero evaluadas a la energía ϵ_2 la probabilidad será $P(\epsilon_2)$. Debido al comportamiento independiente de los entes, estas dos probabilidades son independientes entre sí. Como consecuencia, la probabilidad de que la energía de un ente sea ϵ_1 y que la energía del otro sea ϵ_2 está dada por $P(\epsilon_1)P(\epsilon_2)$. La razón es que las probabilidades independientes son multiplicativas. (Si la probabilidad de obtener cara en un "volado" es $1/2$, entonces la probabilidad de obtener cara en cada uno de dos "volados" es $(1/2) \times (1/2) = 1/4$ ya que los "volados" son independientes).

A continuación, se considerarán todas las divisiones de la energía del sistema en el cual la suma de las energías de los dos entes tiene el mismo valor fijo $\epsilon_1 + \epsilon_2$ que en el caso particular recién estudiado, pero en el cual los dos entes toman porciones diferentes de esta energía ya que la energía total del sistema aislado es constante, para todas estas divisiones el resto del sistema también tendrá un valor fijo de energía. Así para todas ellas existe el mismo número posible de modos para el resto del sistema para distribuir su energía entre sus componentes. Como consecuencia, la probabilidad de estas divisiones en las cuales existe cierta porción de la energía $\epsilon_1 + \epsilon_2$ entre los dos entes, puede diferir de la probabilidad de las otras divisiones, en las cuales existe una porción diferente de dicha energía sólo si estas porciones distintas ocurren con probabilidades diferentes. Si nuevamente se supone que *todas las divisiones posibles de la energía del sistema ocurren con la misma probabilidad*, se ve que esto no puede ser y se concluye que todas las divisiones en las que la misma energía $\epsilon_1 + \epsilon_2$ se distribuye entre los dos entes en formas diferentes ocurren con la misma probabilidad. En otras palabras, la probabilidad de todas estas divisiones es solamente función de $\epsilon_1 + \epsilon_2$ y, por lo tanto, se puede escribir como, por ejemplo $Q(\epsilon_1 + \epsilon_2)$. Sin embargo, anteriormente se concluyó que la probabilidad para un caso particular también se puede escribir como $P(\epsilon_1) \cdot P(\epsilon_2)$. Entonces se encuentra que $P(\epsilon_1) \cdot P(\epsilon_2) = Q(\epsilon_1 + \epsilon_2)$.

El punto esencial aquí es que la función de distribución de probabilidad $P(\mathcal{E})$ tiene la propiedad de que el producto de dos de estas funciones, evaluado para dos valores diferentes de las variables \mathcal{E}_1 y \mathcal{E}_2 es una función de la suma $\mathcal{E}_1 + \mathcal{E}_2$ de estas variables. Pero una función exponencial y sólo una función exponencial, tiene esta propiedad ya que el producto de dos exponenciales con diferentes exponentes es una exponencial cuyo exponente es la suma de los dos exponentes. Específicamente, si se toma que la probabilidad $P(\mathcal{E})$ de encontrar a un ente en un estado con energía \mathcal{E} sea proporcional al número probable $n(\mathcal{E})$ de entes en ese estado, como deberá de ser ciertamente y se usa (C-1) para evaluar $n(\mathcal{E})$ se tiene la función

$$P(\mathcal{E}) = Be^{-\mathcal{E}/\mathcal{E}_0} \quad (\text{C-2})$$

donde B es proporcional a A , lo que demuestra la propiedad requerida ya que

$$P(\mathcal{E}_1)P(\mathcal{E}_2) = Be^{-\mathcal{E}_1/\mathcal{E}_0}Be^{-\mathcal{E}_2/\mathcal{E}_0} = B^2e^{-(\mathcal{E}_1+\mathcal{E}_2)/\mathcal{E}_0} = Q(\mathcal{E}_1 + \mathcal{E}_2)$$

Realmente este argumento no prueba que $n(\mathcal{E})$ es una exponencial decreciente, en vez de una creciente, pero una exponencial creciente se puede desechar sobre bases físicas cuando su valor va a infinito para valores grandes de \mathcal{E} . Entonces, se ha verificado la validez general de (C-1). Ahora se evaluará la constante \mathcal{E}_0 que aparece en (C-1).

$$n(\mathcal{E}) = Ae^{-\mathcal{E}/\mathcal{E}_0}$$

Al tratar un sistema con dos tipos distintos de entes en equilibrio térmico, no es difícil probar que el valor de \mathcal{E}_0 no depende del tipo de entes que componen el sistema. Entonces en este argumento se usarán entes con las propiedades más simples. Puesto que $n(\mathcal{E})$ es el número probable de entes del sistema en un estado de energía \mathcal{E} el número de entes cuyas energías deberían encontrarse en el intervalo entre \mathcal{E} y $\mathcal{E} + d\mathcal{E}$ es igual a $n(\mathcal{E})$ veces el número de estados en ese intervalo. Si este número es independiente del valor de \mathcal{E} (es decir, si los estados están uniformemente distribuidos en energía), entonces el número será proporcional al tamaño de $d\mathcal{E}$ del intervalo. Este es el caso si los entes son osciladores armónicos simples, como los resortes mencionados con anterioridad. Así, el número probable de osciladores armónicos simples con energía entre \mathcal{E} y $\mathcal{E} + d\mathcal{E}$ en un sistema en equilibrio que contenga muchos de ellos, es proporcional a $n(\mathcal{E})d\mathcal{E}$. Si a la constante multiplicativa A se le da el valor adecuado, se puede hacer esta probabilidad igual a $n(\mathcal{E})d\mathcal{E}$. Entonces, la energía promedio de uno de los osciladores es

$$\bar{\mathcal{E}} = \frac{\int_0^{\infty} \mathcal{E} n(\mathcal{E}) d\mathcal{E}}{\int_0^{\infty} n(\mathcal{E}) d\mathcal{E}}$$

La integral en el numerador tiene un integrando que es la energía pesada por el número de osciladores que tienen esa energía; la integral en el denominador es justamente el número total de osciladores. Si se evalúa $n(\mathcal{E})$ de (C-1), se tiene

$$\bar{\mathcal{E}} = \frac{\int_0^{\infty} A\mathcal{E}e^{-\mathcal{E}/\mathcal{E}_0} d\mathcal{E}}{\int_0^{\infty} Ae^{-\mathcal{E}/\mathcal{E}_0} d\mathcal{E}}$$

(Obsérvese que no se necesita conocer el valor de A). Procediendo de una manera completamente análoga a la utilizada en el ejemplo 1-4, excepto que en vez de sumas aparecen integrales, se encuentra

$$\bar{\mathcal{E}} = \mathcal{E}_0 \quad (\text{C-3})$$

Pero según la ley clásica de la equipartición de la energía expresada en (1-16), para osciladores armónicos simples en equilibrio a temperatura T

$$\bar{\mathcal{E}} = kT \quad (\text{C-4})$$

donde k es la *constante de Boltzmann* $k = 1.38 \times 10^{-23}$ joule/°K. Combinando (C-3) y (C-4) se tiene

$$\mathcal{E}_0 = kT \quad (\text{C-5})$$

Este resultado es correcto para entes de cualquier tipo, no obstante que se obtuvo para el caso particular de osciladores armónicos simples. Por lo tanto se puede escribir (C-1) como

$$n(\mathcal{E}) = Ae^{-\mathcal{E}/kT} \quad (\text{C-6})$$

Esta es la famosa *distribución de Boltzmann*. Ya que el valor de A no se especifica, (C-6) describe en realidad una proporcionalidad: el número probable de entes de un sistema en equilibrio a temperatura T en un estado de energía es proporcional a $e^{-\mathcal{E}/kT}$. Expresado en otros términos: la probabilidad de que un estado de energía \mathcal{E} esté ocupado por un ente es proporcional a $e^{-\mathcal{E}/kT}$.

El valor que se escoge para la constante A está determinado por la conveniencia. En el capítulo 1 se aplicó la distribución de Boltzmann a un sistema tal $n(\mathcal{E})d\mathcal{E}$ es proporcional al número probable de osciladores con energía en el intervalo \mathcal{E} a $\mathcal{E} + d\mathcal{E}$ ya que los estados de un oscilador armónico simple están distribuidos uniformemente en energía. Por supuesto, $n(\mathcal{E})d\mathcal{E}$ también es proporcional a la probabilidad $P(\mathcal{E})d\mathcal{E}$ de encontrar un oscilador particular en energía en este intervalo. Entonces se tiene, como en (C-2)

$$P(\mathcal{E}) = Be^{-\mathcal{E}/\mathcal{E}_0}$$

Siempre que la constante B se escoja apropiadamente, lo que se consigue haciendo

$$\int_0^{\infty} P(\mathcal{E}) d\mathcal{E} = \int_0^{\infty} Be^{-\mathcal{E}/\mathcal{E}_0} d\mathcal{E} = B \int_0^{\infty} e^{-\mathcal{E}/\mathcal{E}_0} d\mathcal{E} = 1 \quad (\text{C-7})$$

Esto es, se definió $P(\mathcal{E})d\mathcal{E}$ como la probabilidad de encontrar un oscilador armónico simple particular con energía ente \mathcal{E} y $\mathcal{E} + d\mathcal{E}$ y así por consistencia, se habrá de requerir que $\int_0^{\infty} P(\mathcal{E})d\mathcal{E}$ tenga el valor uno ya que la in-

tegral es justamente la probabilidad de encontrarlo con alguna energía. Evaluando $\int_0^\infty e^{-\mathcal{E}/\mathcal{E}_0} d\mathcal{E}$ en (C-7) y resolviendo para B se encuentra $B = 1/kT$. Entonces, se tiene una forma especial para la distribución de Boltzmann

$$P(\mathcal{E}) = \frac{e^{-\mathcal{E}/\mathcal{E}_0}}{kT} \quad (C-8)$$

que es la que se utilizó en el capítulo 1.

Apéndice D

Trayectorias en la dispersión de Rutherford

La figura 4-4 muestra los parámetros para la trayectoria en la dispersión de una partícula ligera de carga positiva $+ze$ por un núcleo pesado de carga positiva $+Ze$. En el texto se vió que el impulso angular $L = Mr^2 d\varphi/dt$ es constante ya que la fuerza sobre la partícula siempre está actuando en la dirección radial. Aplicando la ley de Newton a la componente radial del movimiento, para determinar la trayectoria de la partícula, y de $F = Ma$ se obtiene

$$\frac{zZe^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = M \left[\frac{d^2 r}{dt^2} - r \left(\frac{d\varphi}{dt} \right)^2 \right] \quad (D-1)$$

donde el término del primer miembro es la fuerza de Coulomb y los del segundo miembro son $d^2 r/dt^2$ la aceleración radial debida al cambio en la magnitud de r y $-r(d\varphi/dt)^2 = -\omega^2 r$ es la aceleración centrípeta (que también está dirigida radialmente) debido al cambio en la dirección de r . Para obtener la trayectoria se necesita encontrar r como función de φ .

Esto simplifica la solución de (D-1) para escribirla no en términos de las coordenadas r, φ , sino en términos de las coordenadas u, φ , donde

$$r = 1/u \quad (D-2)$$

Entonces,

$$\frac{dr}{dt} = \frac{dr}{d\varphi} \frac{d\varphi}{dt} = \frac{dr}{du} \frac{du}{d\varphi} \frac{d\varphi}{dt}$$

o

$$\frac{dr}{dt} = -\frac{1}{u^2} \frac{du}{d\varphi} \frac{Lu^2}{M} = -\frac{L}{M} \frac{du}{d\varphi}$$

y

$$\frac{d^2 r}{dt^2} = \frac{d}{d\varphi} \left(\frac{dr}{dt} \right) \frac{d\varphi}{dt} = -\frac{L}{M} \frac{d^2 u}{d\varphi^2} \frac{Lu^2}{M}$$

o

$$\frac{d^2 r}{dt^2} = -\frac{L^2 u^2}{M^2} \frac{d^2 u}{d\varphi^2}$$

Substituyendo esto en (D-1), se tiene

$$-\frac{L^2 u^2}{M^2} \frac{d^2 u}{d\varphi^2} - \frac{1}{u} \left(\frac{L u^3}{M} \right)' = \frac{z Z e^2 k^2}{4 \pi \epsilon_0 M}$$

o

$$\frac{d^2 u}{d\varphi^2} + u = -\frac{z Z e^2 M}{4 \pi \epsilon_0 L^2} = -\frac{z Z e^2 M}{4 \pi \epsilon_0 M^2 v^2 b^2} \quad (\text{D-3})$$

ya que $L = Mvb$, donde v es la velocidad inicial de la partícula y b es su parámetro de impacto definido en la figura 4-4. Si se hace $D = (z Z e^2 / 4 \pi \epsilon_0) / (M v^2 / 2)$ como en (4-4) se simplifica a

$$\frac{d^2 u}{d\varphi^2} + u = -\frac{D}{2b^2} \quad (\text{D-4})$$

Esta es una ecuación diferencial ordinaria de segundo orden para u como función φ .

La *solución general* para (D-4) es

$$u = A \cos \varphi + B \sin \varphi - D/2b^2 \quad (\text{D-5})$$

que contiene dos constantes arbitrarias A y B . Se puede probar que efectivamente (D-5) es solución de (D-4) evaluando

$$\frac{du}{d\varphi} = -A \sin \varphi + B \cos \varphi$$

y

$$\frac{d^2 u}{d\varphi^2} = -A \cos \varphi - B \sin \varphi$$

y substituyendo esto en (D-4). Esta da

$$-A \cos \varphi - B \sin \varphi + A \cos \varphi + B \sin \varphi - \frac{D}{2b^2} = -D/2b^2$$

Esta identidad prueba la validez de la solución general.

Para obtener la *solución particular* habrán de evaluarse las constantes A y B . Se requiere que (D-5) satisfaga las *condiciones iniciales*: $\varphi \rightarrow 0$ cuando $r \rightarrow \infty$ y $dr/dt \rightarrow -v$ cuando $r \rightarrow \infty$. Entonces,

$$u = \frac{1}{r} = 0 = A \cos 0 + B \sin 0 - \frac{D}{2b^2}$$

o

$$A = \frac{D}{2b^2}$$

y

$$\frac{dr}{dt} = -\frac{L}{M} \frac{du}{d\varphi} = -v = -\frac{L}{M} (-A \sin 0 + B \cos 0)$$

o

$$B = \frac{Mv}{L} = \frac{Mv}{Mvb} = \frac{1}{b}$$

Por lo tanto, la solución particular es

$$u = \frac{D}{2b^2} \cos \varphi + \frac{1}{b} \operatorname{sen} \varphi - \frac{D}{2b^2}$$

■

$$\frac{1}{r} = \frac{1}{b} \operatorname{sen} \varphi + \frac{D}{2b^2} (\cos \varphi - 1) \quad (\text{D-6})$$

Esta es la ecuación de la órbita que da a r como función de φ . Se ve que la trayectoria es hiperbólica, ya que (D-6) es la ecuación de una hipérbole en coordenadas polares.

Apéndice E

Cantidades complejas

El *número imaginario* i es una unidad definida, de modo que

$$i^2 = -1 \quad \text{o} \quad i = \sqrt{-1} \quad (\text{E-1})$$

El nombre es apropiado porque ninguno de los números reales (es decir, ordinarios) tienen cuadrados negativos. En forma general un *número complejo* z se puede escribir

$$z = x + iy \quad (\text{E-2})$$

donde ambos x y y son números reales. Al número x se le llama la *parte real* de z , y al número y se le llama la *parte imaginaria* de z (aunque y es real). Nótese que z se reduce a un número real puro si $y = 0$, y se reduce a un número imaginario puro si $x = 0$.

Los números complejos están sujetos a las leyes del álgebra que se aplican a los números reales, excepto por la propiedad especificada en la definición (E-1). También la definición de igualdad se extiende a los números complejos, entonces, dos números complejos son iguales si y sólo si la parte real de uno es igual a la parte real del otro, y la parte imaginaria de uno es igual a la parte imaginaria del otro.

Entonces,

$$z_1 = z_2 \quad (\text{E-3a})$$

implica

$$x_1 = x_2 \quad y_1 = y_2 \quad (\text{E-3b})$$

y viceversa.

El *complejo conjugado* del número $z = x + iy$ se denota por z^* , y se define como

$$z^* = x - iy \quad (\text{E-4})$$

De la definición se deduce que

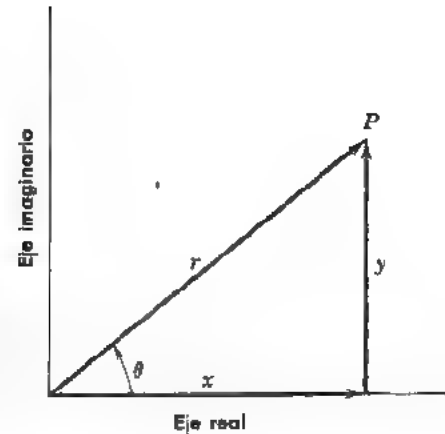
$$z^*z = (x - iy)(x + iy) = x^2 - i^2y^2 - ixy + ixy = x^2 - i^2y^2$$

siendo

$$z^*z = x^2 + y^2 \quad (\text{E-5})$$

FIGURA E-1

Representación geométrica de un número complejo. Las relaciones entre las coordenadas rectangulares y polares del punto representativo P se pueden determinar inspeccionando la figura.



Entonces, el producto de un número complejo por su complejo conjugado siempre es igual a un número real. La ecuación (E-5) sugiere el teorema Pitagórico. De hecho, hay una representación de números complejos muy útil en la figura E-1. La ubicación de un punto P , relativo a los que se llaman *los ejes real e imaginario del plano complejo*, está dada en la manera definida en la figura para especificar la parte real x y la parte imaginaria y del número complejo asociado. La localización del punto P representativo se puede especificar por las coordenadas polares r y θ , llamados *módulo* y *fase* que están definidos en la figura. Los dos conjuntos de coordenadas están relacionados por

$$x = r \cos \theta$$

$$y = r \sin \theta \quad (\text{E-6})$$

y

$$r^2 = x^2 + y^2$$

$$\cos \theta = \frac{x}{r} \quad \sin \theta = \frac{y}{r} \quad (\text{E-7})$$

De (E-2) y (E-6), se observa que un número complejo en general se puede expresar en coordenadas polares como

$$z = r(\cos \theta + i \sin \theta) \quad (\text{E-8})$$

Nótese también que

$$z^* z = r^2 \quad (\text{E-9})$$

Considerando las rotaciones en el plano complejo del punto representativo P pueden revelarse importantes relaciones. En la figura E-2, z es un número complejo representado por un punto P en el eje real. Si a r constante se gira al punto representativo por un ángulo $d\theta$, el número complejo correspondiente cambia a $z + dz$. Se aprecia en la figura que

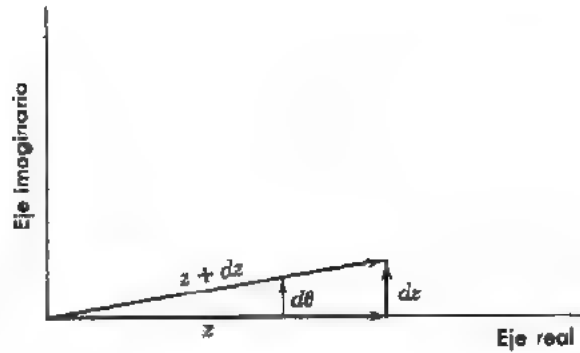
$$dz = iz d\theta$$

o

$$\frac{dz}{z} = i d\theta$$

FIGURA E-2

Ilustración de una rotación, a distancia constante desde el origen, de un punto representativo.



Como puede verse, esta relación es independiente de la posición inicial del punto representativo y por lo tanto es integrable.

$$\int_{z_{\text{inicial}}}^{z_{\text{final}}} \frac{dz}{z} = i \int_0^{\Theta} d\theta$$

Que resulta en

$$\ln \frac{z_{\text{final}}}{z_{\text{inicial}}} = i\Theta$$

o

$$z_{\text{final}} = z_{\text{inicial}} e^{i\Theta}$$

Si se toma $r = 1$, entonces $z_{\text{inicial}} = 1$ y de la figura (E-8) también se tiene $z_{\text{final}} = \cos \Theta + i \sin \Theta$.

De este modo, se obtiene una evaluación del *exponencial complejo*

$$e^{i\Theta} = \cos \Theta + i \sin \Theta \quad (\text{E-10})$$

La rotación en el sentido negativo resulta

$$e^{-i\Theta} = \cos(-\Theta) + i \sin(-\Theta)$$

que es

$$e^{-i\Theta} = \cos \Theta - i \sin \Theta \quad (\text{E-11})$$

Por adición y sustracción de (E-10) y (E-11), se deduce inmediatamente que

$$\cos \Theta = \frac{e^{i\Theta} + e^{-i\Theta}}{2} \quad (\text{E-12})$$

y

$$\sin \Theta = \frac{e^{i\Theta} - e^{-i\Theta}}{2i} \quad (\text{E-13})$$

La comparación de la definición de (E-4) con (E-10) y (E-11) muestran que el complejo conjugado de una exponencial compleja se obtiene cambiando el signo de i que aparece en el exponente. Eso es

$$(e^{i\Theta})^* = e^{-i\Theta} \quad (\text{E-14})$$

Aplicando (E-9) y (E-14) a una exponencial compleja, se encuentra

$$r^2 = z^* z = (e^{i\Theta})^* e^{i\Theta} = e^{-i\Theta} e^{i\Theta} = e^0 = 1$$

Por lo tanto, un exponencial complejo mantiene constante al módulo $r = 1$, aunque su fase está cambiando. Pero su parte real e imaginaria, que son de (E-2) y (E-6) iguales a coseno y seno, son funciones oscilatorias de la fase Θ . Si su fase está aumentando continuamente de 0 a $\pi/2$ o π a $3\pi/2$ y así sucesivamente, una exponencial compleja cambia en valor de $+1$ a $+i$ a -1 a $-i$ a $+1$ y se repite cíclicamente. En este sentido es una función oscilatoria de su fase.

Al diferenciar e integrar una cantidad compleja, se usan los procedimientos usuales del cálculo tratando a i como cualquier otra constante. Un ejemplo de integración se encuentra en el cálculo que condujo a (E-10). Como otro ejemplo, la primera derivada de la exponencial compleja es

$$\frac{de^{i\Theta}}{d\Theta} = ie^{i\Theta} \quad (\text{E-15})$$

Aunque la interpretación geométrica conduce naturalmente a representar la fase de una exponencial compleja como un ángulo Θ , puede utilizarse cualquier cantidad que, como un ángulo, sea adimensional. Los exponenciales complejos más utilizados en mecánica cuántica son:

$$e^{ikx} \qquad e^{i(kx - \omega t)} \qquad e^{-iEt/\hbar}$$

En el primero de ellos, por ejemplo el número de onda k tiene las dimensiones de (longitud)⁻¹, entonces k multiplicado por la longitud x es adimensional. Todas las relaciones anotadas para $e^{i\Theta}$ tienen extensión obvia a e^{ikx} . Por ejemplo, la aplicación de las reglas de diferenciación a e^{ikx} , con k constante, produce

$$\frac{de^{ikx}}{dx} = ike^{ikx} \quad (\text{E-16})$$

Solución numérica de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para un potencial de pozo cuadrado

En la mecánica cuántica como en otros campos de la ciencia y la ingeniería, muchos de los cálculos que surgen en el trabajo profesional ordinario se llevan a cabo con computadoras y utilizando técnicas numéricas. En algunos casos, la función energía potencial que nos interesa es de tal naturaleza que su ecuación de Schrödinger independiente del tiempo no se puede resolver ni aun con las técnicas analíticas más generales. (Por las razones explicadas en el apéndice H). En otros casos es posible obtener soluciones analíticas, pero resulta más conveniente obtener soluciones numéricas si se dispone de una computadora adecuada. Como una ilustración simple de las técnicas numéricas y de los "cálculos imaginarios" de la sección 5-7, se obtendrá aquí una solución numérica de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para la función energía potencial

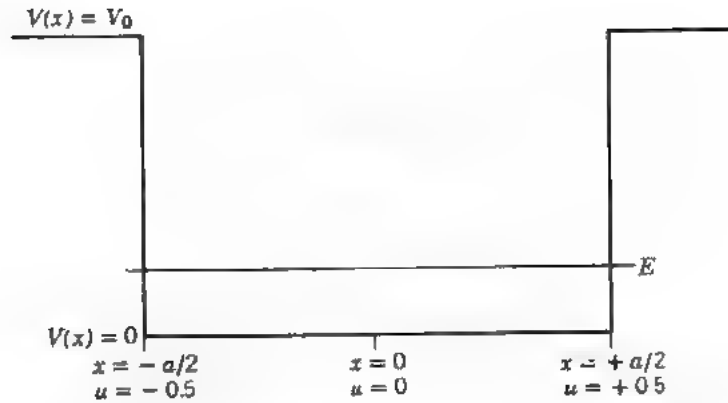
$$V(x) = \begin{cases} V_0, \text{ const} & x < -a/2 \text{ o } x > +a/2 \\ 0 & -a/2 < x < +a/2 \end{cases} \quad (\text{F-1})$$

A esto se le llama un *pozo de potencial cuadrado*, por las razones que son evidentes de la gráfica mostrada en la figura F-1. Para este potencial simple, se puede encontrar una solución numérica muy rápidamente utilizando tan sólo una calculadora pequeña, siempre que no se requiera demasiada precisión. Para este potencial en particular también es posible resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo mediante técnicas analíticas sencillas (véase apéndice G) de modo que se podrá comparar los resultados de la solución exacta con los resultados aproximados que se obtuvieron en la solución numérica.

De los argumentos de la sección 5-7 se sabe que el comportamiento de una solución $\psi(x)$ de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (5-45).

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E]\psi(x)$$

para el potencial $V(x)$ y energía total E quedará determinada completamente para toda x mediante la ecuación y suponiendo valores iniciales para $\psi(x)$ y $d\psi(x)/dx$. Para ver esto explícitamente, observe que se puede calcular los

**FIGURA F-1**

Un pozo de potencial cuadrado y un supuesto valor de la energía total E para una partícula ligada en este potencial.

valores de la solución y su primera derivada en un punto x_1 , próximo al punto inicial x_0 , en términos de los valores de estas cantidades en el punto inicial, de la manera siguiente. Para $(x_1 - x_0)$ muy pequeño, el valor de la solución en x_1 , que se denotará por $[\psi(x)]_{x_1}$, está dado según la definición de la derivada por

$$[\psi(x)]_{x_1} - [\psi(x)]_{x_0} \simeq \left[\frac{d\psi(x)}{dx} \right]_{x_0} (x_1 - x_0) \quad (\text{F-2})$$

donde $[\psi(x)]_{x_0}$ es el valor supuesto para la solución en x_0 , y $[d\psi(x)/dx]_{x_0}$ es el valor supuesto para su primera derivada en dicho punto. A partir de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es posible obtener una fórmula similar para $[d\psi(x)/dx]_{x_1}$ en términos de cantidades conocidas, si se escribe

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{d}{dx} \left[\frac{d\psi(x)}{dx} \right] = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E]\psi(x)$$

y después se multiplican ambos miembros por la diferencial dx para obtener

$$d \left[\frac{d\psi(x)}{dx} \right] = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E]\psi(x) dx$$

Según la definición de diferencial, esto es

$$\left[\frac{d\psi(x)}{dx} \right]_{x_1} - \left[\frac{d\psi(x)}{dx} \right]_{x_0} \simeq \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E]_{x_0} [\psi(x)]_{x_0} (x_1 - x_0) \quad (\text{F-3})$$

donde $(x_1 - x_0)$ es muy pequeño. Repitiendo el procedimiento para el nuevo punto de partida x_1 , se puede encontrar los valores de $\psi(x)$ y $d\psi(x)/dx$ en un punto más cercano x_2 . Continuando de esta manera, se puede construir la solución y su derivada para todos los valores de x .

Para aplicar (F-2) y (F-3) a la función potencial de (F-1) resulta conveniente dividir todo entre el ancho a del pozo potencial. De esta manera las ecuaciones se pueden reescribir en términos de la variable espacial adimensional

$$u = \frac{x}{a} \quad (\text{F-4})$$

quedando la ecuación (F-2)

$$[\psi(u)]_{u_1} = [\psi(u)]_{u_0} + \left[\frac{d\psi(u)}{du} \right]_{u_0} (u_1 - u_0) \quad (\text{F-5})$$

y (F-3)

$$\left[\frac{d\psi(u)}{du} \right]_{u_1} = \left[\frac{d\psi(u)}{du} \right]_{u_0} + \frac{2ma^2}{\hbar^2} [V(u) - E]_{u_0} [\psi(u)]_{u_0} (u_1 - u_0) \quad (\text{F-6})$$

Por supuesto que para que se pueda obtener una solución numérica a la ecuación diferencial, se deberá especificar la profundidad V_0 del pozo de potencial. La forma de (F-6) sugiere que es más conveniente el hacerlo especificando el valor de la combinación adimensional de los parámetros $2ma^2V_0/\hbar^2$. Para propósitos de cálculo ilustrativo, se puede escoger cualquier valor razonable. Así, se toma arbitrariamente

$$\frac{2ma^2V_0}{\hbar^2} = 64 \quad (\text{F-7})$$

Si también se expresa la energía total como

$$E = \alpha V_0 \quad (\text{F-8})$$

donde α es un parámetro adimensional, entonces (F-6) toma la forma adimensional

$$\left[\frac{d\psi(u)}{du} \right]_{u_1} = \left[\frac{d\psi(u)}{du} \right]_{u_0} + [C(u)]_{u_0} [\psi(u)]_{u_0} (u_1 - u_0) \quad (\text{F-9})$$

donde

$$C(u) = \frac{2ma^2E}{\hbar^2} = -\frac{2ma^2\alpha V_0}{\hbar^2} = -64\alpha \quad -0.5 < u < +0.5$$

$$\frac{2ma^2}{\hbar^2} [V_0 - E] = \frac{2ma^2V_0}{\hbar^2} [1 - \alpha] = 64[1 - \alpha] \quad (\text{F-10})$$

$$u < -0.5 \text{ o } u > +0.5$$

Se realizarán los cálculos numéricos en (F-5) y (F-9) que se han efectuado sin dimensiones puesto que sólo involucran números puros. Los cálculos serán con el propósito de determinar aproximadamente la energía E más baja permitida y la forma de la correspondiente eigenfunción ψ , para una partícula de masa m inmersa en el pozo de potencial cuadrado especificado por (F-2) y (F-7).

De los argumentos cualitativos de la sección 5-7 se sabe que en la región interna del pozo cuadrado la eigenfunción de menor energía aparecerá como la mitad de una onda coseno dentro de la región. Sin embargo, tendrá una longitud de onda mayor, ya que se extiende un poco hacia las regiones exteriores. Para calcular el impulso p correspondiente a la mitad de la longitud de onda $\lambda/2 = a$ que está en la región interna, se puede utilizar la relación de Broglie $p = h/\lambda = h/2a$, y la correspondiente energía $E = p^2/2m = \hbar^2/8ma^2 = \pi^2\hbar^2/2ma^2$ con objeto de ayudar a estimar el valor de E y ahorrar una cantidad considerable de esfuerzo en los cálculos numéricos. El valor estimado de E , en términos de α , es $\alpha = E/V_0 = (\pi^2\hbar^2/2ma^2)/(32\hbar^2/ma^2) = \pi^2/64 = 0.154$. Puesto que λ está subestimada, E y α están sobreestimadas. Por lo tanto se hace una

TABLA F-1. Una integración numérica.

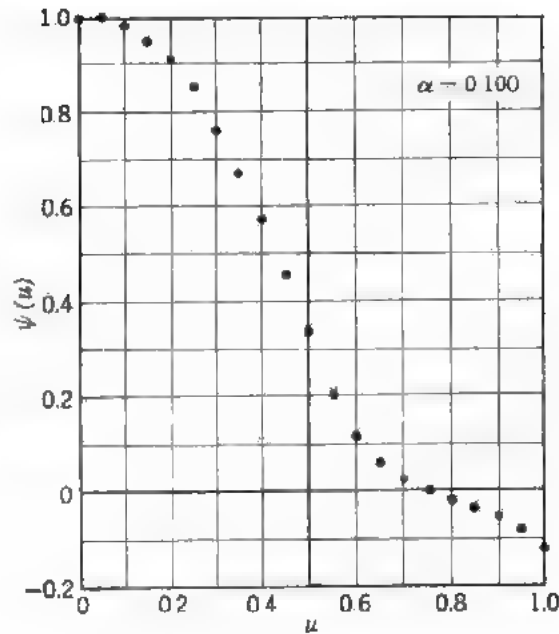
$\alpha = 0.100$		$1 - \alpha = 0.900$		
$C = -6.40$		$0 \leq u < 0.500$		
$+57.6$		$u \geq 0.500$		
u	ψ	$d\psi/du$	$(d\psi/du) \Delta u$	$C\psi\Delta u$
0.000	+1.000	0.000	0.000	-0.320
0.050	+1.000	-0.320	-0.016	-0.320
0.100	+0.984	0.640	0.032	-0.315
0.150	+0.952	-0.955	-0.048	-0.305
0.200	+0.904	-1.260	-0.063	-0.289
0.250	+0.841	-1.549	-0.077	-0.269
0.300	+0.764	-1.818	-0.091	-0.244
0.350	+0.673	-2.062	-0.103	-0.215
0.400	+0.570	-2.277	-0.114	-0.182
0.450	+0.456	-2.459	-0.123	-0.146
0.500	+0.333	-2.605	-0.130	+0.959
0.550	+0.203	-1.646	-0.082	+0.585
0.600	+0.121	-1.061	-0.053	+0.348
0.650	+0.068	-0.713	-0.036	+0.196
0.700	+0.032	-0.517	-0.026	+0.092
0.750	+0.006	-0.425	-0.021	+0.017
0.800	-0.015	-0.408	-0.020	-0.043
0.850	-0.035	-0.451	-0.023	-0.101
0.900	-0.058	-0.552	-0.028	-0.167
0.950	-0.086	-0.719	-0.036	-0.248
1.000	-0.122	-0.967		

suposición fundamentada y se intenta en el cálculo numérico inicial, el valor de $\alpha = 0.100$. Considerando lo que se ha aprendido de los argumentos cualitativos resulta evidente que la eigenfunción para la energía más baja permitida en este potencial deberá ser simétrica alrededor del punto $u = 0$, con relación al cual el potencial mismo es simétrico. Esto simplifica mucho las cosas ya que solamente se necesita hacer cálculos para la región $u \geq 0$, y por la simetría se llega de inmediato a la conclusión de que $d\psi(u)/du = 0$ para $u = 0$ por lo tanto, se empezará por calcular para $u = 0$. Puesto que la selección de $\psi(u)$ para $u = 0$ es intrascendente debido a la linealidad de la ecuación diferencial, se tomará $\psi(u) = +1.000$ en este punto. Si se toma $u_1 - u_0 = 0.050$, se obtendrá suficiente precisión y así sucesivamente. En la tabla F-1 se muestra el primer cálculo.

El primer renglón de la tabla especifica los valores supuestos de $\psi(u)$ y $d\psi(u)/du$ para $u = 0$, y proporciona parte de la primera etapa del cálculo. Todos los integrantes de este renglón son cantidades evaluadas para $u = 0.000$. El primero es el valor de ψ ; el segundo el valor de $d\psi/du$; el tercero es $d\psi/du$ multiplicado por $\Delta u = 0.050$, que es el cambio en u del primero al segundo renglón; y el cuarto ψ se multiplica $C\Delta u$. Para todos los renglones a partir del denotado por $u = 0.450$, $C\Delta u = -6.40 \times 0.050 = -0.320$; más allá de este punto $C\Delta u = +57.6 \times 0.050 = +2.88$. El segundo renglón completa la primera etapa del cálculo y constituye parte de la siguiente. De acuerdo con (F-5) y (F-9), la primera cifra del segundo renglón anterior; la segunda cifra es la suma de la segunda y cuarta cifras del renglón anterior. Para construir el resto de la tabla se sigue el mismo esquema. Los cálculos se terminarán en $u = 1.000$ ya que rápidamente se fue a $-\infty$, tal como se

FIGURA F-2

Una solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para un pozo de potencial cuadrado. La solución empieza a irse a menos infinito para u grandes debido a que el valor supuesto para la energía total es ligeramente grande.



puede ver en la gráfica de la figura F-2. Esto ocurrió porque el valor escogido para α fue muy grande. En consecuencia, se dobla muy rápidamente en la región interior y, por lo tanto, se va a cero en cuanto se está fuera de esta región. Una vez que se va a cero, nada puede evitar que se vaya a $-\infty$.

TABLA F-2. Una segunda integración numérica.

$$\alpha = 0.098 \quad 1 - \alpha = 0.902$$

$$C = \begin{matrix} -6.27 \\ +57.7 \end{matrix} \quad \begin{matrix} 0 \leq u < 0.500 \\ u \geq 0.500 \end{matrix}$$

u	ψ	$d\psi/du$	$(d\psi/du) \Delta u$	$C\psi\Delta u$
0.000	+1.000	0.000	0.000	-0.314
0.050	+1.000	-0.314	-0.016	-0.314
0.100	+0.984	-0.628	-0.031	-0.309
0.150	+0.953	-0.937	-0.047	-0.299
0.200	+0.906	-1.236	-0.062	-0.284
0.250	+0.844	-1.520	-0.076	-0.265
0.300	+0.768	-1.785	-0.089	-0.241
0.350	+0.679	-2.026	-0.101	-0.213
0.400	+0.578	-2.239	-0.112	-0.181
0.450	+0.466	-2.420	-0.121	-0.146
0.500	+0.345	-2.566	-0.128	+0.996
0.550	+0.217	-1.570	-0.079	+0.626
0.600	+0.138	-0.944	-0.047	+0.398
0.650	+0.091	-0.546	-0.027	+0.263
0.700	+0.064	-0.283	-0.014	+0.185
0.750	+0.050	-0.098	-0.005	+0.144
0.800	+0.045	+0.046	+0.002	+0.130
0.850	+0.047	+0.176	+0.009	+0.136
0.900	+0.056	+0.312	+0.016	+0.162
0.950	+0.072	+0.474	+0.024	+0.208
1.000	+0.096	+0.682		

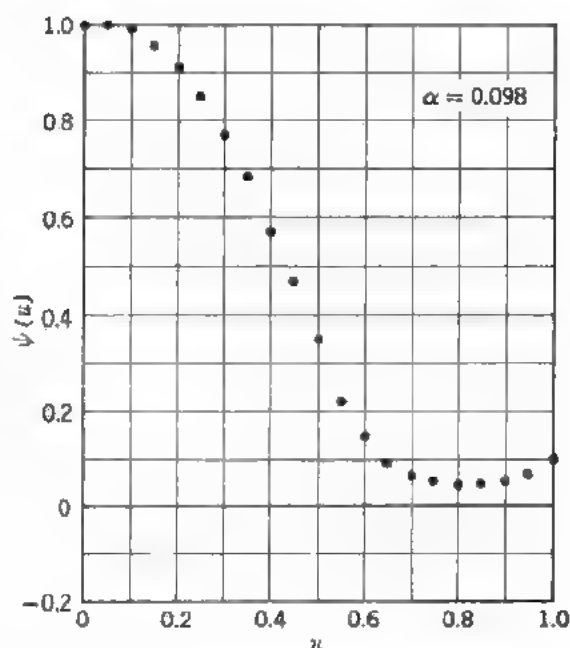
En la tabla F-2 se muestra un segundo cálculo, utilizando $\alpha = 0.098$, y su gráfica se muestra en la figura F-3. Este también falla, pero en el sentido opuesto, ya que ψ se dobla alejándose del eje en la región exterior y tiende a irse a $+\infty$. Sin embargo, los resultados de los dos cálculos indican que el valor permitido de α está entre 0.100 y 0.098 y una comparación entre las dos curvas da la impresión de que debe estar más próxima al límite inferior. Se pueden hacer algunos cálculos más para precisar más los límites, pero sería necesario disminuir el valor de Δu , y aumentar el número de cifras decimales con objeto de reducir la imprecisión numérica de los cálculos para este potencial. Y utilizando métodos analíticos se obtiene una solución a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (véase apéndice G) que da el valor $\alpha = 0.0977$ para la menor energía permitida. La concordancia con este cálculo numérico es buena, pero no perfecta debido a la imprecisión numérica mencionada. La solución analítica también muestra que existen dos energías ligadas permitidas que corresponden a $\alpha = 0.375$ y $\alpha = 0.810$. Por supuesto, que cualquier energía no ligada correspondiente a $\alpha \geq 1$, está permitida.

La técnica que se ha utilizado se llama *integración numérica*. El primer vocablo es apropiado ya que se empieza con una ecuación que contiene $d^2\psi/dx^2$ y se obtiene finalmente ψ misma; por lo tanto, se ha realizado un proceso inverso a la diferenciación.

Si el estudiante tiene acceso a una máquina calculadora, encontrará fácil e interesante el realizar una integración numérica de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Si tiene acceso a una computadora, aun del tamaño más pequeño, encontrará que realizando integraciones numéricas para estados ligados y no ligados en varios potenciales, rápidamente puede desarrollar un sentimiento intuitivo para muchos de los hechos importantes de la mecánica cuántica.

FIGURA F-3

Una solución a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para un pozo de potencial cuadrado. La solución se va a más infinito para u grande debido a que el valor supuesto para la energía total es ligeramente pequeño.



Solución analítica de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para un potencial de pozo cuadrado

Siguiendo el procedimiento que se estudió cualitativamente en la sección 6-7, aquí se desarrolla la solución general de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para los estados ligados de un pozo de potencial cuadrado de profundidad finita. Se aplican los resultados al caso particular de un pozo de potencial cuadrado con los mismos parámetros que se usaron en la solución numérica del apéndice F.

La descripción del movimiento clásico de una partícula ligada en un pozo cuadrado sugiere que sería más apropiado buscar soluciones a la ecuación de Schrödinger en la forma de ondas estacionarias. Por lo tanto, se toma como una solución general a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en la región $-a/2 < x < +a/2$ dado $V(x) = 0$, la eigenfunción de onda estacionaria para partícula libre (6-62) que se escribe como

$$\psi(x) = A \sin k_1 x + B \cos k_1 x \quad -a/2 < x < +a/2 \quad (G-1)$$

donde

$$k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar$$

En las regiones $x < -a/2$ y $x > +a/2$ la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo tiene las soluciones generales descritas por (6-63) y (6-64), que son

$$\psi(x) = C e^{k_1 x} + D e^{-k_1 x} \quad x < -a/2 \quad (G-2)$$

y

$$\psi(x) = F e^{k_1 x} + G e^{-k_1 x} \quad x > +a/2 \quad (G-3)$$

donde

$$k_1 = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar \quad \text{con } E < V_0$$

Para determinar las constantes arbitrarias, primero se impone el requisito de que las eigenfunciones permanezcan finitas para toda x . Considerando (G-2) en el límite $x \rightarrow -\infty$, Este requisito exige

$$D = 0 \quad (G-4)$$

Similarmente, es necesario hacer

$$F = 0 \quad (G-5)$$

con el propósito de que (G-3) permanezca finita en el límite $x \rightarrow +\infty$. A continuación se impone el requisito de que las eigenfunciones y sus primeras derivadas sean continuas en $x = -a/2$ y $x = +a/2$. con lo que se obtienen las cuatro ecuaciones

$$-A \sin(k_I a/2) + B \cos(k_I a/2) = C e^{-k_{II} a/2} \quad (G-6)$$

$$A k_I \cos(k_I a/2) + B k_I \sin(k_I a/2) = C k_{II} e^{-k_{II} a/2} \quad (G-7)$$

$$A \sin(k_I a/2) + B \cos(k_I a/2) = G e^{-k_{II} a/2} \quad (G-8)$$

$$A k_I \cos(k_I a/2) - B k_I \sin(k_I a/2) = -G k_{II} e^{-k_{II} a/2} \quad (G-9)$$

Restando (G-6) de (G-8) se obtiene

$$2A \sin(k_I a/2) = (G - C) e^{-k_{II} a/2} \quad (G-10)$$

Sumando (G-6) y (G-8)

$$2B \cos(k_I a/2) = (G + C) e^{-k_{II} a/2} \quad (G-11)$$

Restando (G-9) y (G-7)

$$2B k_I \sin(k_I a/2) = (G + C) k_{II} e^{-k_{II} a/2} \quad (G-12)$$

Sumando (G-9) y (G-7)

$$2A k_I \cos(k_I a/2) = -(G - C) k_{II} e^{-k_{II} a/2} \quad (G-13)$$

Exigiendo que $B \neq 0$ y $(G + C) \neq 0$, se puede dividir (G-12) entre (G-11) y obtener

$$k_I \tan(k_I a/2) = k_{II} \quad \text{si } B \neq 0 \text{ y } (G + C) \neq 0 \quad (G-14)$$

Exigiendo que $A \neq 0$ y $(G - C) \neq 0$, se puede dividir (G-13) entre (G-10) resultando

$$k_I \cot(k_I a/2) = -k_{II} \quad \text{si } A \neq 0 \text{ y } (G - C) \neq 0 \quad (G-15)$$

Es fácil ver que (G-14) y (G-15) no se pueden satisfacer simultáneamente. Si se pudiera, la ecuación que se obtiene de sumarias

$$k_I \tan(k_I a/2) + k_I \cot(k_I a/2) = 0$$

sería válida. Multiplicando por $\tan(k_I a/2)$ la ecuación resulta en

$$k_I \tan^2(k_I a/2) + k_I = 0$$

o

$$\tan^2(k_I a/2) = -1$$

que no puede ser válida si tanto k_I como $a/2$ son reales. Entonces, solamente es posible que o satisfacen (G-14) pero no (G-15), o satisfacen (G-15) pero no (G-14). Las eigenfunciones del pozo de potencial cuadrado forman dos clases. Para la primera clase

$$\begin{aligned} k_I \tan(k_I a/2) &= k_{II} \\ A &= 0 \\ G - C &= 0 \end{aligned} \quad (G-16)$$

y entonces (G-8) resulta en

$$\begin{aligned} B \cos(k_I a/2) &= G e^{-k_{II} a/2} \\ G &= B \cos(k_I a/2) e^{k_{II} a/2} = C \end{aligned}$$

y las eigenfunciones son

$$\psi(x) = \begin{cases} [B \cos(k_I a/2) e^{k_{II} a/2}] e^{k_{II} x} & x < -a/2 \\ [B] \cos(k_I x) & -a/2 < x < a/2 \\ [B \cos(k_I a/2) e^{k_{II} a/2}] e^{-k_{II} x} & x > a/2 \end{cases} \quad (G-17)$$

Para la segunda clase

$$\begin{aligned} k_I \cot(k_I a/2) &= -k_{II} \\ B &= 0 \\ G + C &= 0 \end{aligned} \quad (G-18)$$

Entonces (G-8) resulta en

$$\begin{aligned} A \sin(k_I a/2) &= G e^{-k_{II} a/2} \\ G &= A \sin(k_I a/2) e^{k_{II} a/2} = -C \end{aligned}$$

y las eigenfunciones son

$$\psi(x) = \begin{cases} [-A \sin(k_I a/2) e^{k_{II} a/2}] e^{k_{II} x} & x < -a/2 \\ [A] \sin(k_I x) & -a/2 < x < a/2 \\ [A \sin(k_I a/2) e^{k_{II} a/2}] e^{-k_{II} x} & x > a/2 \end{cases} \quad (G-19)$$

Considérese la primera de las (G-16). Evaluando k_I y k_{II} , y multiplicando por $a/2$, la ecuación queda

$$\sqrt{m E a^2 / 2 \hbar^2} \tan(\sqrt{m E a^2 / 2 \hbar^2}) = \sqrt{m(V_0 - E) a^2 / 2 \hbar^2} \quad (G-20)$$

Para una partícula dada de masa m y un pozo de potencial dado de profundidad V_0 y ancho a existe una ecuación en una incógnita E . Sus soluciones son los valores permitidos para la energía total de la partícula que son los eigenvalores para las eigenfunciones de primera clase. Las soluciones de esta ecuación trascendente solamente se pueden obtener por métodos numéricos o gráficos. Se presenta un método gráfico simple que ilustrará los rasgos importantes de la ecuación. Haciendo el cambio de variable

$$\mathcal{E} = \sqrt{m E a^2 / 2 \hbar^2} \quad (G-21)$$

así que la ecuación resulta

$$\mathcal{E} \tan \mathcal{E} = \sqrt{m V_0 a^2 / 2 \hbar^2 - \mathcal{E}^2} \quad (G-22)$$

si se grafica la función

$$p(\mathcal{E}) = \mathcal{E} \tan \mathcal{E}$$

y la función

$$q(\mathcal{E}) = \sqrt{m V_0 a^2 / 2 \hbar^2 - \mathcal{E}^2}$$

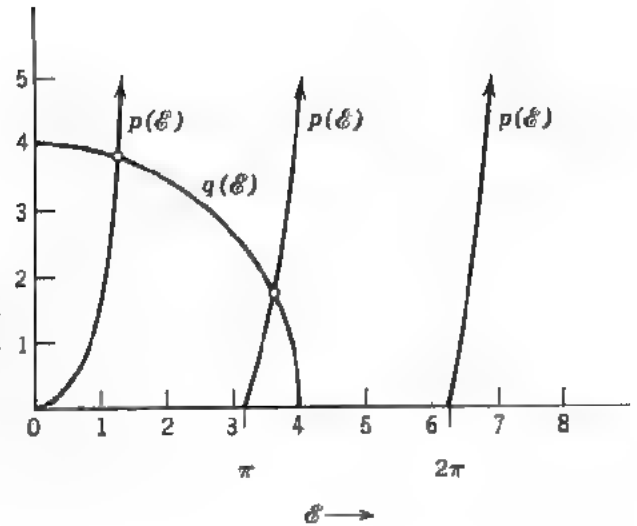
Las intersecciones especifican los valores de \mathcal{E} que son soluciones de (G-22).

FIGURA G-1

Solución gráfica de la ecuación para eigen valores de primera clase para un pozo de potencial cuadrado particular. Solución de

$$\mathcal{E} \tan \mathcal{E} = \sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2 - \mathcal{E}^2}$$

$$\circ p(\mathcal{E}) = q(\mathcal{E}).$$



En la figura G-1 se muestra esta gráfica. La función $p(\mathcal{E})$ tiene ceros en $\mathcal{E} = 0, \pi, 2\pi, \dots$ y tiene asíntotas en $\mathcal{E} = \pi/2, 3\pi/2, 5\pi/2, \dots$. La función $q(\mathcal{E})$ es un cuarto de círculo de radio $\sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2}$. De la figura es evidente que el número de soluciones que existen para (G-22) dependen del radio del círculo, cada solución resulta un eigenvalor para $E < V_0$ que corresponde a una eigenfunción de la primera clase. Si $\sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2} < \pi$; existe uno de estos eigenvalores; dos si $\pi \leq \sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2} < 2\pi$; tres si $2\pi \leq \sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2} < 3\pi$; etc...

El caso $\sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2} = 4$ se ilustra en la figura. Observe que esto corresponde a $2mV_0a^2/\hbar^2 = 64$, que es el valor utilizado en la integración numérica del apéndice F. Para este caso existen dos soluciones: $\mathcal{E} \approx 1.25$ y $\mathcal{E} \approx 3.60$. De (G-21), los eigenvalores son

$$E = \mathcal{E}^2 \frac{2\hbar^2}{ma^2} = \mathcal{E}^2 \frac{2\hbar^2}{mV_0a^2} V_0 \approx \left(\frac{1.25}{4}\right)^2 V_0 \approx 0.0977 V_0$$

y

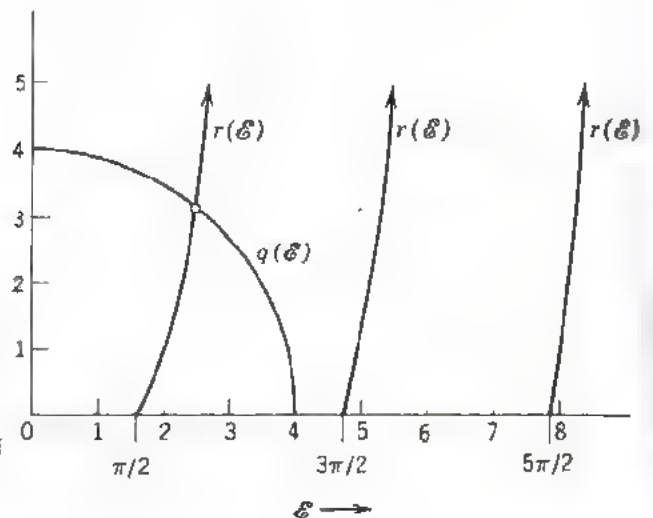
$$E = \mathcal{E}^2 \frac{2\hbar^2}{mV_0a^2} V_0 \approx \left(\frac{3.60}{4}\right)^2 V_0 \approx 0.810 V_0$$

FIGURA G-2

Solución gráfica de la ecuación de eigen valores de segunda clase para un pozo de potencial cuadrado particular. Solución de

$$-\mathcal{E} \cot \mathcal{E} = \sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2 - \mathcal{E}^2}$$

$$\circ r(\mathcal{E}) = q(\mathcal{E}).$$



Los eigenvalores que corresponden a eigenfunciones de la segunda clase se determinan de las soluciones de una ecuación análoga que se obtiene de (G-18), y que es

$$-\epsilon \cot \epsilon = \sqrt{mV_0 a^2/2\hbar^2 - \epsilon^2} \quad (\text{G-23})$$

La figura G-2 muestra la solución de esta ecuación. Es evidente que no habrá eigenvalores para $E < V_0$ que corresponden a eigenfunciones de la segunda clase si $\sqrt{mV_0 a^2/2\hbar^2} < \pi/2$; habrá uno si $\pi/2 \leq \sqrt{mV_0 a^2/2\hbar^2} < 3\pi/2$; dos si $3\pi/2 \leq \sqrt{mV_0 a^2/2\hbar^2} < 5\pi/2$; etc. La figura muestra el caso $\sqrt{mV_0 a^2/2\hbar^2} = 4$. La solución simple a (G-23) es $\epsilon \simeq 2.47$, y el eigenvalor es

$$E = \epsilon^2 \frac{2\hbar^2}{mV_0 a^2} V_0 \simeq \left(\frac{2.47^2}{4}\right) V_0 \simeq 0.383V_0$$

Se ve que para un pozo de potencial dado solamente existe un número restringido de valores permitidos de la energía total E para $E < V_0$. Estos son los eigenvalores discretos para los estados ligados de la partícula. Por otra parte, se sabe que para $E > V_0$; está permitido cualquier valor de E ; los eigenvalores para los estados no ligados forman un continuo. Para un pozo de potencial poco profundo o muy estrecho o ambas cosas, solamente uno de los eigenvalores de la primera clase será ligado. Incrementando los valores de $\sqrt{mV_0 a^2/2\hbar^2}$ se encontrará un eigenvalor ligado de la segunda clase. De este parámetro para valores aún más grandes se tendrá otro eigenvalor más de la primera clase. A continuación, otro eigenvalor de la segunda clase queda ligado, etc. Considerando como ejemplo el caso $\sqrt{mV_0 a^2/2\hbar^2} = 4$. El potencial y los eigenvalores discretos y continuos están ilustrados a escala en la figura G-3. Se ha utilizado los números cuánticos $n = 1, 2, 3, 4, 5, \dots$ para marcar los eigenvalores en orden creciente de energía. Para este potencial sólo los tres primeros eigenvalores son ligados.

De las soluciones E de (G-22) y (G-23) para un valor dado de $\sqrt{mV_0 a^2/2\hbar^2}$, se pueden evaluar las formas explícitas de las eigenfunciones (G-17) y (G-19). Las relaciones requeridas son

$$k_{\text{I}} \frac{2}{a} = \epsilon \quad \text{y} \quad k_{\text{II}} \frac{a}{2} = \sqrt{mV_0 a^2/2\hbar^2 - \epsilon^2} \quad (\text{G-24})$$

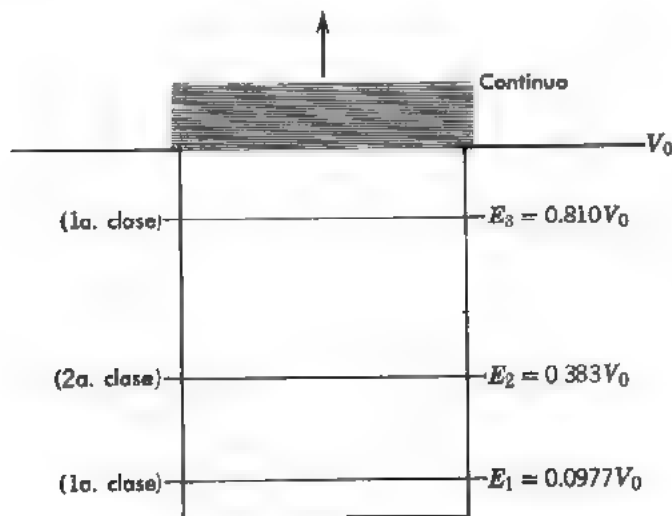


FIGURA G-3

Los eigenvalores para un pozo de potencial cuadrado particular.

El valor de la constante A o B se puede ajustar de modo que cada eigenfunción satisfaga la condición de normalización. Para el caso $\sqrt{mV_0a^2/2\hbar^2} = 4$, las tres eigenfunciones normalizadas que corresponden a los eigenvalores E_1 , E_2 , E_3 son

$$\begin{aligned}
 & 17.9 \frac{1}{\sqrt{a}} e^{3.80 \frac{x}{a/2}} & x \leq -a/2 \\
 \psi_1(x) = & 1.26 \frac{1}{\sqrt{a}} \cos \left(1.25 \frac{x}{a/2} \right) & -a/2 \leq x \leq a/2 \\
 & 17.9 \frac{1}{\sqrt{a}} e^{-3.80 \frac{x}{a/2}} & x \geq a/2 \\
 & -18.6 \frac{1}{\sqrt{a}} e^{3.18 \frac{x}{a/2}} & x \leq -a/2 \\
 \psi_2(x) = & 1.23 \frac{1}{\sqrt{a}} \sin \left(2.47 \frac{x}{a/2} \right) & -a/2 \leq x \leq a/2 \quad (\text{G-25}) \\
 & 18.6 \frac{1}{\sqrt{a}} e^{-3.18 \frac{x}{a/2}} & x \geq a/2 \\
 & -5.80 \frac{1}{\sqrt{a}} e^{1.74 \frac{x}{a/2}} & x \leq -a/2 \\
 \psi_3(x) = & 1.13 \frac{1}{\sqrt{a}} \cos \left(3.60 \frac{x}{a/2} \right) & -a/2 \leq x \leq a/2 \\
 & 5.80 \frac{1}{\sqrt{a}} e^{-1.74 \frac{x}{a/2}} & x \geq a/2
 \end{aligned}$$

En la figura G-4 se representa como función de $x/(a/2)$ las eigenfunciones multiplicadas por \sqrt{a} ,

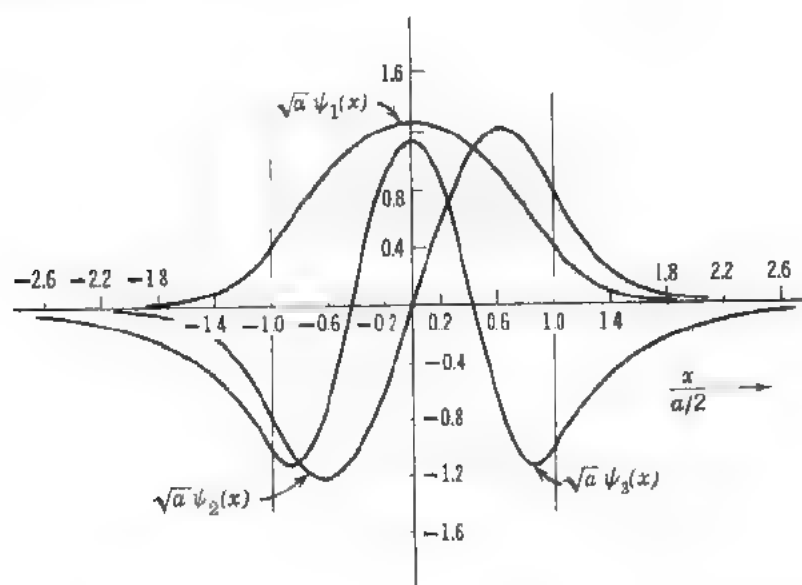


FIGURA G-4

Las eigenfunciones para los eigenestados ligados de un pozo de potencial cuadrado particular.

Solución en serie de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para un potencial de oscilador armónico simple

En este apéndice se utilizarán técnicas analíticas para resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para una partícula de masa m ligada en el potencial de oscilador armónico simple

$$V(x) = \frac{C}{2} x^2 \quad (\text{H-1})$$

donde C es la constante de la fuerza restauradora lineal. Estas técnicas se estudian ampliamente no sólo por la importancia del oscilador armónico simple, sino también porque la solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el átomo con un sólo electrón incluye técnicas que son casi idénticas. Los estudiantes con inclinación matemática encontrarán esto muy interesante.

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el potencial es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{C}{2} x^2 \psi = E\psi \quad (\text{H-2})$$

Si se evalúa la constante de fuerza C en términos de la frecuencia clásica de oscilación,

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{C}{m}} \quad (\text{H-3})$$

la ecuación resulta

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + 2\pi^2 m \nu^2 x^2 \psi = E\psi$$

o

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \left(\frac{2\pi m \nu}{\hbar} \right)^2 x^2 \right] \psi = 0$$

Introduciendo los parámetros

$$\alpha = 2\pi m \nu / \hbar \quad \text{y} \quad \beta = 2mE/\hbar^2 \quad (\text{H-4})$$

La ecuación toma la forma más condensada

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + (\beta - \alpha^2 x^2)\psi = 0 \quad (\text{H-5})$$

Resulta conveniente expresar esto en términos de la variable adimensional

$$u = \sqrt{\alpha} x = \left[\frac{2\pi m}{\hbar^2 \pi} \left(\frac{C}{m} \right)^{1/2} \right]^{1/2} x = \frac{(Cm)^{1/4}}{\hbar^{1/2}} x \quad (\text{H-6})$$

Se tiene

$$\frac{d\psi}{dx} = \frac{du}{dx} \frac{d\psi}{du} = \sqrt{\alpha} \frac{d\psi}{du}$$

y

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{du}{dx} \frac{d}{du} \left(\frac{d\psi}{du} \right) = \alpha \frac{d^2\psi}{du^2}$$

De modo que la ecuación resulta

$$\alpha \frac{d^2\psi}{du^2} + (\beta - \alpha u^2)\psi = 0$$

o

$$\frac{d^2\psi}{du^2} + \left(\frac{\beta}{\alpha} - u^2 \right) \psi = 0 \quad (\text{H-7})$$

Se deben encontrar soluciones para las cuales $\psi(x)$ y su primera derivada sean monovaluadas, continuas y finitas para toda u desde $-\infty$ a $+\infty$. Las primeras dos condiciones se satisfarán automáticamente por las soluciones que se obtendrán. Sin embargo, será necesario tomar en consideración explícitamente el requisito de que $\psi(u)$ permanezca finita cuando $|u| \rightarrow \infty$. Para este propósito es útil considerar primero la forma de $\psi(u)$ para valores muy grandes de $|u|$.

Ahora, para cualquier valor finito de la energía total E , la cantidad β/α resulta insignificante comparada con u^2 para valores muy grandes de $|u|$. Entonces de (H-7) se podrá escribir

$$\frac{d^2\psi}{du^2} = u^2\psi \quad |u| \rightarrow \infty \quad (\text{H-8})$$

La solución general para esta ecuación diferencial es

$$\psi = Ae^{-u^2/2} + Be^{u^2/2} \quad (\text{H-9})$$

donde A y B son constantes arbitrarias. Se verifica que esta es una solución a (H-8) calculando

$$\frac{d\psi}{du} = A(-u)e^{-u^2/2} + Bue^{u^2/2}$$

y

$$\begin{aligned} \frac{d^2\psi}{du^2} &= A(-u)^2 e^{-u^2/2} - Ae^{-u^2/2} + Bu^2 e^{u^2/2} + Be^{u^2/2} \\ &= A(u^2 - 1)e^{-u^2/2} + B(u^2 + 1)e^{u^2/2} \end{aligned}$$

Puesto que, para $|u| \rightarrow \infty$, esto esencialmente es

$$\frac{d^2\psi}{du^2} = Au^2e^{-u^2/2} + Bu^2e^{u^2/2}$$

o

$$\frac{d^2\psi}{du^2} = u^2(Ae^{-u^2/2} + Be^{u^2/2}) = u^2\psi$$

es obvio que (H-8) se satisface idénticamente.

Enseguida, se aplica la condición de que las eigenfunciones deben permanecer finitas cuando $|u| \rightarrow \infty$. Es claro de (H-9) que esto requiere que se haga $B=0$. Entonces la forma de las eigenfunciones para $|u|$ muy grandes deberán ser

$$\psi(u) = Ae^{-u^2/2} \quad |u| \rightarrow \infty \quad (\text{H-10})$$

La forma que se encontró en (H-10) sugiere que se habrá de buscar soluciones para la ecuación diferencial desarrollada totalmente, (H-7) y que se puedan escribir

$$\psi(u) = Ae^{-u^2/2}H(u) \quad (\text{H-11})$$

Estas soluciones deben de ser válidas para *toda* u . Por lo tanto, para que (H-11) esté de acuerdo con (H-10) la $H(u)$ deberán ser funciones que varíen lentamente comparadas con $e^{-u^2/2}$ cuando $|u| \rightarrow \infty$. En lo que resta, la $H(u)$ deberá tener cualquier forma de las requeridas para obtener las formas correctas para la $\psi(u)$. Para evaluar la $H(u)$, se calcula

$$\frac{d\psi}{du} = -Aue^{-u^2/2}H + Ae^{-u^2/2}\frac{dH}{du}$$

y

$$\begin{aligned} \frac{d^2\psi}{du^2} &= -Ae^{-u^2/2}H + Au^2e^{-u^2/2}H - Aue^{-u^2/2}\frac{dH}{du} \\ &\quad - Aue^{-u^2/2}\frac{dH}{du} + Ae^{-u^2/2}\frac{d^2H}{du^2} \\ &= Ae^{-u^2/2}\left(-H + u^2H - 2u\frac{dH}{du} + \frac{d^2H}{du^2}\right) \end{aligned}$$

y substituyendo ψ y $d^2\psi/du^2$ en (H-7) se obtiene

$$Ae^{-u^2/2}\left(-H + u^2H - 2u\frac{dH}{du} + \frac{d^2H}{du^2}\right) + \frac{\beta}{\alpha}Ae^{-u^2/2}H - Au^2e^{-u^2/2}H = 0$$

Dividiendo entre $Ae^{-u^2/2}$, y cancelando términos que contengan u^2H , se tiene

$$\frac{d^2H}{du^2} - 2u\frac{dH}{du} + \left(\frac{\beta}{\alpha} - 1\right)H = 0 \quad (\text{H-12})$$

Esta ecuación diferencial determina las funciones $H(u)$.

Recapitulando. Se empieza con la ecuación de Schrödinger (H-7). Por razones que se explicarán, esta ecuación no se puede resolver directamente. Sin embargo, escribiendo las soluciones a la ecuación como productos de la función $Ae^{-u^2/2}$, que es de la forma de las soluciones para $|u| \rightarrow \infty$, multiplicada

por las funciones $H(u)$, se transforma el problema al de resolver (H-12). Esta ecuación es soluble mediante la *técnica de series de potencias*; que es la técnica más general de que se dispone para la solución analítica de una ecuación diferencial. Se empieza por suponer que la solución se puede escribir como una serie de potencias en la variable independiente. Esto, es, se supone

$$H(u) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i u^i \equiv a_0 + a_1 u + a_2 u^2 + a_3 u^3 + \dots \quad (\text{H-13})$$

Los coeficientes a_0, a_1, a_2, \dots se determinan substituyendo (H-13) en (H-12) y exigiendo que la ecuación resultante se satisfaga para cualquier valor de u . Calculando las derivadas

$$\frac{dH}{du} = \sum_{i=1}^{\infty} i a_i u^{i-1} \equiv 1 a_1 + 2 a_2 u + 3 a_3 u^2 + \dots$$

y

$$\frac{d^2 H}{du^2} = \sum_{i=2}^{\infty} (i-1) a_i u^{i-2} \equiv 1 \cdot 2 a_2 + 2 \cdot 3 a_3 u + 3 \cdot 4 a_4 u^2 + \dots$$

y substituyendo en la ecuación diferencial, para obtener

$$\begin{aligned} & 1 \cdot 2 a_2 + 2 \cdot 3 a_3 u + 3 \cdot 4 a_4 u^2 + 4 \cdot 5 a_5 u^3 + \dots \\ & - 2 \cdot 1 a_1 u - 2 \cdot 2 a_2 u^2 - 2 \cdot 3 a_3 u^3 - \dots \\ & + (\beta/\alpha - 1) a_0 + (\beta/\alpha - 1) a_1 u + (\beta/\alpha - 1) a_2 u^2 + (\beta/\alpha - 1) a_3 u^3 + \dots = 0 \end{aligned}$$

Ya que esto es cierto para todos los valores de u , los coeficientes de cada potencia de u deberán anularse individualmente de modo que la validez de la ecuación no dependa del valor de u . Reuniendo los coeficientes e igualándolos a cero se tiene

$$\begin{aligned} u^0: & \quad 1 \cdot 2 a_2 + (\beta/\alpha - 1) a_0 = 0 \\ u^1: & \quad 2 \cdot 3 a_3 + (\beta/\alpha - 1 - 2 \cdot 1) a_1 = 0 \\ u^2: & \quad 3 \cdot 4 a_4 + (\beta/\alpha - 1 - 2 \cdot 2) a_2 = 0 \\ u^3: & \quad 4 \cdot 5 a_5 + (\beta/\alpha - 1 - 2 \cdot 3) a_3 = 0 \end{aligned}$$

para la l -ésima potencia de u , la relación es

$$u^l: \quad (l+1)(l+2) a_{l+2} + (\beta/\alpha - 1 - 2l) a_l = 0$$

□

$$a_{l+2} = - \frac{(\beta/\alpha - 1 - 2l)}{(l+1)(l+2)} a_l \quad (\text{H-14})$$

que se le denomina *relación de recurrencia*.

La relación permite calcular, sucesivamente, los coeficientes a_2, a_4, a_6, \dots en términos de a_0 y los coeficientes a_3, a_5, a_7, \dots en términos de a_1 y los coeficientes a_0 , y a_1 no están determinados por la relación de recurrencia, pero es como si lo estuvieran. Ya que la ecuación diferencial para $H(u)$ contiene una segunda derivada su *solución general* debería contener dos constantes arbitrarias. Entonces se ve que la solución general se parte en dos series independientes que se escriben

$$H(u) = a_0 \left(1 + \frac{a_2}{a_0} u^2 + \frac{a_4}{a_2} \frac{a_2}{a_0} u^4 + \frac{a_6}{a_4} \frac{a_4}{a_2} \frac{a_2}{a_0} u^6 + \dots \right)$$

$$+ a_1 \left(u + \frac{a_3}{a_1} u^3 + \frac{a_5}{a_3} \frac{a_3}{a_1} u^5 + \frac{a_7}{a_5} \frac{a_5}{a_3} \frac{a_3}{a_1} u^7 + \dots \right) \quad (\text{H-15})$$

Las razones a_{l+2}/a_l están dadas por la relación de recurrencia. La primera serie es una función par de u y la segunda es una función impar de esta variable. La razón por la que (H-7) no se puede resolver directamente mediante la aplicación de la técnica de series de potencias es que ésta conduce a una relación de recurrencia que contiene más de dos coeficientes. Esto lo puede demostrar el estudiante de inmediato aplicando la técnica. Si intenta escribir una ecuación análoga a (H-15), verá que la técnica falla ya que en una ecuación que contiene una segunda derivada sólo pueden existir dos constantes arbitrarias en su solución. Se pudo superar la dificultad transformando el problema por el de resolver (H-12). Esencialmente el mismo truco tiene éxito para las ecuaciones diferenciales que surgen en la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para el potencial de Coulomb, $V(r) \propto r^{-1}$, de un átomo con un electrón. Existen otros potenciales para los cuales el truco no funciona y no existe solución analítica. Por supuesto, *cualquier* potencial se puede tratar por las técnicas numéricas del apéndice F.

Para un valor arbitrario de β/α , tanto la serie par como la impar (H-15) contendrán un número infinito de términos. Como se verá, esto no conduce a eigenfunciones *acceptables*. Considérese ambas series y evalúe la razón de los coeficientes de potencias sucesivas de u para l grandes. Esto da

$$\frac{a_{l+2}}{a_l} = - \frac{(\beta/\alpha - 1 - 2l)}{(l+1)(l+2)} \simeq \frac{2l}{l^2} = \frac{2}{l}$$

Comparándola con la misma razón para la expansión en series de potencias de la función e^{u^2} , que es

$$e^{u^2} = 1 + u^2 + \frac{u^4}{2!} + \frac{u^6}{3!} + \dots + \frac{u^l}{(l/2)!} + \frac{u^{l+1}}{(l/2+1)!} + \dots$$

Para l grandes, la razón de los coeficientes de potencias sucesivas de u es

$$\frac{1/(l/2+1)!}{1/(l/2)!} = \frac{(l/2)!}{(l/2+1)!} \stackrel{\text{nota } (L+1)! = (L/L)! (L/L+1)}{=} \frac{(l/2)!}{(l/2+1)(l/2)!} = \frac{1}{l/2+1} \simeq \frac{1}{l/2} = \frac{2}{l}$$

Las dos razones son la misma. Lo que significa que los términos de las potencias altas en las series para e^{u^2} pueden diferir de los términos correspondientes en las series pares de $H(u)$ por no más que una constante multiplicativa K . Sólo pueden diferir de los términos en las series impares de $H(u)$ por u veces otra constante K' . Pero para $|u| \rightarrow \infty$, los términos de las potencias bajas en u no son importantes para la determinación del valor de cualesquiera de estas series. En consecuencia, se concluye que

$$H(u) = a_0 K e^{u^2} + a_1 K' u e^{u^2} \quad |u| \rightarrow \infty$$

Según (H-11), las soluciones a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo son

$$\psi(u) = A e^{-u^2/2} H(u)$$

Entonces, si las series de $H(u)$ contienen un número infinito de términos, el comportamiento de estas soluciones para $|u| \rightarrow \infty$ es

$$A e^{-u^2/2} H(u) = a_0 A K e^{u^2/2} + a_1 A K' u e^{u^2/2} \quad |u| \rightarrow \infty$$

Pero esto aumenta sin límite conforme $|u| \rightarrow \infty$, que no es un comportamiento aceptable para una eigenfunción. Sin embargo, se pueden obtener eigenfunciones aceptables para ciertos valores de β/α . En cualesquiera de ellas se hace la constante arbitraria a_0 , igual a cero. Entonces se fuerza a que la serie restante de $H(u)$ termine, haciendo

$$\beta/\alpha = 2n + 1 \quad (\text{H-16})$$

donde

$$n = 1, 3, 5, \dots \quad \text{si } a_0 = 0$$

$$n = 0, 2, 4, \dots \quad \text{si } a_1 = 0$$

De (H-14) es obvio que este escogimiento de β/α ocasionará que la serie termine en el n -ésimo término ya que se tendrá, para $l = n$

$$a_{n+2} = -\frac{(\beta/\alpha - 1 - 2n)}{(n+1)(n+2)} a_n = -\frac{(2n+1-1-2n)}{(n+1)(n+2)} a_n = 0$$

Los coeficientes $a_{n+4}, a_{n+6}, a_{n+8}, \dots$ también serán cero ya que son proporcionales a a_{n+2} . La solución resultante $H_n(u)$ son polinomios de orden n llamados *polinomios de Hermite*. Cada $H_n(u)$ se puede evaluar de (H-15) calculando los coeficientes a partir de la relación de ocurrencia con β/α dado por (H-16) para el valor de n correspondiente. En la tabla 6-1 se pueden ver los primeros polinomios de Hermite. Estos son factores que multiplican $A_n e^{-u^2/2}$ (En cada caso la constante arbitraria a_0 o a_1 se ha escogido de tal modo que los coeficientes de cada potencia de u se puedan escribir como enteros simples).

Para las soluciones en polinomios a la *ecuación diferencial de Hermite* (H-12), las eigenfunciones correspondientes

$$\psi_n(u) = A_n e^{-u^2/2} H_n(u) \quad (\text{H-17})$$

tendrán siempre el comportamiento aceptable yéndose a cero conforme $|u| \rightarrow \infty$. La razón es que, para $|u|$, grandes la función exponencial $e^{-u^2/2}$ varía mucho más rápidamente que el polinomio $H_n(u)$ que domina completamente el comportamiento de las eigenfunciones.

Evalutando α y β de (H-4) se obtiene inmediatamente de (H-16)

$$\frac{2mE}{\hbar^2} \frac{\hbar}{2\pi m\nu} = \frac{2E}{2\pi\hbar\nu} = \frac{2E}{\hbar\nu} = 2n + 1$$

■

$$E = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\nu \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (\text{H-18})$$

Estos son los eigenvalores del potencial de oscilador armónico simple expresados en término de su frecuencia de oscilación clásica.

El laplaciano y los operadores de impulso angular en coordenadas polares esféricas

El operador Laplaciano

El operador Laplaciano ∇^2 que aparece en la ecuación de Schrödinger tridimensional, está definido en coordenadas rectangulares

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (\text{I-1})$$

Aquí se muestra la manera de transformar el operador a la forma que toma en coordenadas polares esféricas, que es

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \quad (\text{I-2})$$

La forma más directa de llevar a cabo la transformación es hacer aplicaciones repetidas de la "regla de la cadena" de la diferenciación parcial. Este es un procedimiento tedioso. Pero el primer término de (I-2) se puede obtener sin mucho tedio considerando un caso en el cual el laplaciano opera sobre una función $\psi = \psi(r)$ de la coordenada radial solamente. En este caso, las derivadas en los dos últimos términos de (I-2) dan cero y se tiene

$$\nabla^2 \psi = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right)$$

Esta expresión se obtendrá de

$$\nabla^2 \psi = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2}$$

que es el laplaciano (I-1) a coordenadas rectangulares, operando sobre $\psi(r)$. Para hacer esto, se utiliza la relación

$$r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$$

que conecta las coordenadas rectangulares y las polares esféricas (véase figura 7-2)

Evaluando

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial r} = \frac{x}{(x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}} \frac{\partial \psi}{\partial r} = \frac{x}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r}$$

y

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{x}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) = \frac{\partial x}{\partial x} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + x \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) \\ \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} &= \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + x \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) \\ \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} &= \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{x^2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right)\end{aligned}$$

Similarmente, las derivadas de y y z son

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{y^2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right)$$

y

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{z^2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right)$$

Sumando estas tres expresiones, se obtiene

$$\nabla^2 \psi = \frac{3}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{(x^2 + y^2 + z^2)}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right)$$

o

$$\nabla^2 \psi = \frac{3}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \right)$$

Obsérvese que la expresión anterior se reduce a

$$\nabla^2 \psi = \frac{3}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + r \left(-\frac{1}{r^2} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} \right)$$

o

$$\nabla^2 \psi = \frac{2}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2}$$

Obsérvese también que el primer término de (I-2), esto es

$$\nabla^2 \psi - \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right)$$

se reduce a

$$\nabla^2 \psi = \frac{1}{r^2} \left(2r \frac{\partial \psi}{\partial r} + r^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} \right)$$

o

$$\nabla^2 \psi = \frac{2}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2}$$

Una comparación muestra que la expresión que se obtuvo es idéntica al primer término de (I-2). El segundo y tercer términos se pueden obtener tomando $\psi = \psi(\varphi)$ y a continuación $\psi = \psi(\theta)$.

Los operadores de impulso angular

En coordenadas rectangulares los operadores para las tres componentes del impulso angular orbital son

$$\begin{aligned}
L_{x_{op}} &= -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \\
L_{y_{op}} &= -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \\
L_{z_{op}} &= -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)
\end{aligned}
\quad (I-3)$$

Cuando se transforman a coordenadas polares esféricas estos operadores toman las formas

$$\begin{aligned}
L_{x_{op}} &= i\hbar \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\
L_{y_{op}} &= i\hbar \left(-\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\
L_{z_{op}} &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}
\end{aligned}
\quad (I-4)$$

Tomando como ejemplo $L_{z_{op}}$ que es el caso más simple, se mostrará que estas expresiones son equivalentes. Para hacerlo se usarán las relaciones

$$\begin{aligned}
x &= r \sin \theta \cos \varphi \\
y &= r \sin \theta \sin \varphi \\
z &= r \cos \theta
\end{aligned}
\quad (I-5)$$

que conectan las coordenadas rectangulares y polares esféricas (véase figura 7-2).

Es más fácil si se empieza por aplicar la regla de la cadena y obtener $\partial \psi / \partial \varphi$

$$\frac{\partial \psi}{\partial \varphi} = \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \varphi} + \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \varphi} + \frac{\partial \psi}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \varphi}$$

De (I-5), se tiene

$$\begin{aligned}
\frac{\partial x}{\partial \varphi} &= -r \sin \theta \sin \varphi = -y \\
\frac{\partial y}{\partial \varphi} &= r \sin \theta \cos \varphi = x \\
\frac{\partial z}{\partial \varphi} &= 0
\end{aligned}$$

Entonces,

$$\frac{\partial \psi}{\partial \varphi} = -y \frac{\partial \psi}{\partial x} + x \frac{\partial \psi}{\partial y}$$

Como ecuación entre operadores, queda

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} = -y \frac{\partial}{\partial x} + x \frac{\partial}{\partial y}$$

que verifica la equivalencia de las dos formas de $L_{z_{op}}$ expresadas en (I-3) e (I-4). Se puede hacer cálculos similares para $L_{x_{op}}$ y $L_{y_{op}}$.

En coordenadas rectangulares, el operador para el cuadrado de la magnitud del impulso angular orbital es

$$L_{op}^2 = L_{x_{op}}^2 + L_{y_{op}}^2 + L_{z_{op}}^2 \quad (I-6)$$

Elevando al cuadrado $L_{x_{op}}$, $L_{y_{op}}$ y $L_{z_{op}}$ y sumando se encuentra, después de algunas manipulaciones de las funciones senoidales que

$$L_{op}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \quad (I-7)$$

Obsérvese la relación entre (I-7) y los dos últimos términos de (I-2). Esto forma la base de una forma alternativa para obtener estos términos, que se pueden encontrar en los libros de matemáticas.

Apéndice J

La precesión de Thomas

El efecto relativista que introduce el factor $1/2$ en (8-25) para la energía potencial debida a la orientación spin-órbita se llama precesión de Thomas. No es difícil entenderlo si se mantiene la geometría lo suficientemente simple. Para este propósito, suponga que el electrón se mueve alrededor del núcleo en una órbita de Bohr circular, como se muestra en la figura J-1. La figura muestra la situación como vista por un observador en el sistema en reposo xy , fijo en el núcleo. El electrón está momentáneamente en reposo en el sistema x_1y_1 en el instante t_1 y momentáneamente en reposo en el sistema x_2y_2 en un instante ligeramente posterior t_2 . Tanto de x_1y_1 según los ve un observador en x_1y_1 . No obstante, se mostrará que el observador en xy ve los ejes de x_2y_2 ligeramente girados con relación a sus propios ejes. Ve los ejes del sistema x_3y_3 aún más girados etc. Entonces, observa que el conjunto de ejes en el cual el electrón está instantáneamente en reposo está precesiendo, en relación a su propio sistema de ejes, conforme el electrón revoluciona en torno al núcleo aún cuando los observadores instantáneamente en reposo con relación al electrón sostienen que cada conjunto de ejes $x_{n+1}y_{n+1}$ es paralelo al conjunto precedente x_n . Utilizando una secuencia de sistemas de referencia en los cuales el electrón está momentáneamente en reposo y cuyos movimientos relativos entre ellos sean a velocidad constante y con relación al sistema xy , se puede aplicar la teoría especial de la relatividad al problema aún cuando el electrón está acelerado respecto al sistema xy .

La figura J-2 muestra xy , x_1y_1 y x_2y_2 desde el punto de vista del observador en x_1y_1 . Puesto que el electrón se está moviendo con velocidad v relativa al

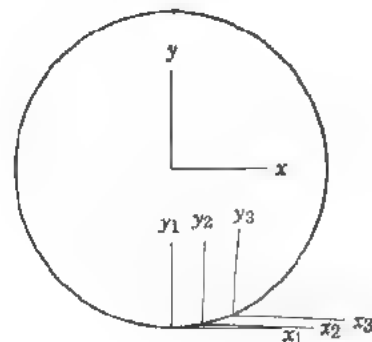
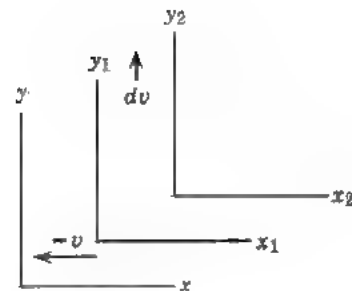


FIGURA J-1

Sistemas de referencia utilizados para calcular la precesión de Thomas.

FIGURA J-2

Sistemas de referencia utilizados para calcular la precesión de Thomas, visto el sistema x_1y_1 .



núcleo, los ejes xy se mueven con velocidad $-v$ en la dirección negativa del eje x_1 con relación a x_1y_1 . Visto desde x_1y_1 el electrón se está acelerando hacia el núcleo con aceleración a en dirección positiva del eje y_1 . Si el intervalo de tiempo $(t_2 - t_1)$ es muy pequeño, el cambio en velocidad del electrón en este intervalo es

$$dv = a(t_2 - t_1) = a \, dt \quad (\text{J-1})$$

y ésta será la velocidad de x_2y_2 vista por x_1y_1 . Ahora utilizando las ecuaciones de transformación relativistas para la velocidad del apéndice A para evaluar los componentes de u_a , la velocidad de x_2y_2 vista por xy . Esto produce

$$u_{ax} = \frac{dv_x - v_x}{1 - \frac{v_x dv_x}{c^2}} = \frac{0 + v}{1 - \frac{-v \cdot 0}{c^2}} = v$$

$$u_{ay} = \frac{dv_y \sqrt{1 - \frac{v_x^2}{c^2}}}{1 - \frac{v_x dv_x}{c^2}} = dv \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}$$

Utilizando las mismas ecuaciones de transformación para evaluar los componentes de u_b , la velocidad de xy vista por x_2y_2 , se tiene

$$u_{bx} = \frac{v_x \sqrt{1 - \frac{dv_y^2}{c^2}}}{1 - \frac{dv_y v_y}{c^2}} = \frac{-v \sqrt{1 - \frac{dv^2}{c^2}}}{1 - \frac{dv \cdot 0}{c^2}} = -v \sqrt{1 - \frac{dv^2}{c^2}}$$

$$u_{by} = \frac{v_y - dv_y}{1 - \frac{dv_y v_y}{c^2}} = -dv$$

Enseguida, calculando el ángulo entre el vector u_a el eje x del sistema xy . Esto

$$\theta_a = \frac{u_{ay}}{u_{ax}} = \frac{dv \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}{v}$$

El ángulo entre el vector u_b y el eje x del sistema x_2y_2 es

$$\theta_b = \frac{u_{b_y}}{u_{b_x}} = \frac{-dv}{-v \sqrt{1 - \frac{dv^2}{c^2}}}$$

La figura J-3 muestra los sistemas x_2y_2 y xy desde el punto de vista de xy . Debido a la equivalencia de los sistemas inerciales, u_a y u_b serán opuestas en dirección. Puesto que los ángulos entre los ejes x y los vectores velocidad relativa no son los mismos, el sistema x_2y_2 aparece girado con relación al sistema xy . El ángulo de rotación es

$$d\theta = \theta_b - \theta_a = \left(\frac{dv}{v \sqrt{1 - \frac{dv^2}{c^2}}} - \frac{dv}{v \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \right)$$

Como dv es una diferencial, se debe despreciar dv^2/c^2 y obtener

$$d\theta = \frac{dv}{v} \left(1 - \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \right)$$

Como la velocidad de un electrón en un átomo de un solo electrón es relativamente pequeña comparada con la velocidad de la luz $v^2/c^2 \ll 1$. (Esto también es cierto para los electrones causantes del espectro óptico en otros átomos). Entonces se puede obtener una excelente aproximación de $d\theta$ haciendo un desarrollo binomial de la raíz cuadrada manteniendo solo los dos primeros términos. Esto es

$$\begin{aligned} d\theta &\simeq \frac{dv}{v} \left[1 - \left(1 - \frac{v^2}{2c^2} \right) \right] \\ &= \frac{dv v^2}{2vc^2} = \frac{v dv}{2c^2} = \frac{va dt}{2c^2} \end{aligned}$$

donde se ha evaluado dv de (J-1). Los ejes en los cuales el electrón está instantáneamente en reposo preceden con relación al núcleo, con la llamada *frecuencia de Thomas*.

$$\omega_T = \frac{d\theta}{dt} = \frac{va}{2c^2}$$

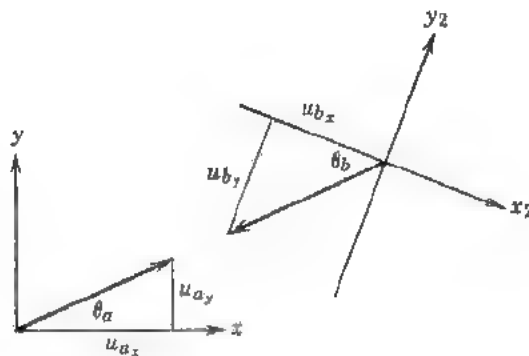


FIGURA J-3

Ilustración exagerada de la precesión de Thomas.

Una inspección a las figuras verificará que el sentido de precesión está dado por la ecuación vectorial

$$\omega_T = -\frac{1}{2c^2} \mathbf{v} \times \mathbf{a} \quad (\text{J-2})$$

Con relación a los sistemas en los cuales el electrón está en reposo, su momento dipolar magnético de spin precede en el campo magnético que experimenta a la frecuencia de Larmor ω . Pero estos sistemas también preceden con frecuencia ω_T relativa al sistema nuclear en reposo. Consecuentemente el momento dipolar se ve que precede con frecuencia angular

$$\omega' = \omega + \omega_T \quad (\text{J-3})$$

Utilizando una ecuación análoga a (8-14) más (8-24) y evaluando g_s y μ_b , se tiene

$$\omega = -\frac{g_s \mu_b}{c^2 \hbar} \mathbf{v} \times \mathbf{E} = -\frac{2e\hbar}{2mc^2 \hbar} \mathbf{v} \times \mathbf{E} = -\frac{e}{mc^2} \mathbf{v} \times \mathbf{E} \quad (\text{J-4})$$

Para evaluar ω_T en términos similares, se usará la ley de Newton para expresar la aceleración del electrón como función del campo eléctrico $\mathbf{a} = \mathbf{F}/m = -e\mathbf{E}/m$. Con lo cual (J-2) conduce a

$$\omega_T = \frac{e}{2mc^2} \mathbf{v} \times \mathbf{E} \quad (\text{J-5})$$

Entonces, la frecuencia de precesión en el sistema nuclear en reposo es

$$\omega' = -\frac{e}{mc^2} \mathbf{v} \times \mathbf{E} + \frac{e}{2mc^2} \mathbf{v} \times \mathbf{E} = -\frac{e}{2mc^2} \mathbf{v} \times \mathbf{E} \quad (\text{J-6})$$

Comparando (J-4) y (J-6) se ve que el efecto de transformar la frecuencia de precesión del dipolo magnético de spin, de los sistemas a los cuales el electrón está en reposo, al sistema normal en el cual el núcleo está en reposo, es reducir su magnitud por exactamente un factor de 1/2. Lo mismo ocurre para la energía potencial de orientación ΔE ya que la magnitud de la cantidad es proporcional a la magnitud de la frecuencia de precesión ω . Esto se puede ver de ecuaciones análogas a (8-13) y (8-14)

$$\Delta E = -\mu_s \cdot \mathbf{B} = \frac{g_s \mu_b}{\hbar} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B}$$

y

$$\omega = \frac{g_s \mu_b}{\hbar} \mathbf{B}$$

Con lo que se completa la verificación del factor 1/2 en (8-25).

Apéndice K

El principio de exclusión en el acoplamiento LS

Si un átomo contiene dos o más electrones que tienen valores comunes de los números cuánticos n y l , por estar en la misma subcapa, el principio de exclusión les impone restricciones sobre los posibles valores de los demás números cuánticos. En la aproximación de Hartree, estos son los números cuánticos m_l y m_s de cada electrón. En este caso, el principio de exclusión establece simplemente que dos electrones no pueden tener el mismo conjunto de los cuatro números cuánticos. En el acoplamiento LS , los números cuánticos que se utilizan para cada electrón, además de n y l , son l' , s' , j' , m_j' . Estos números cuánticos especifican el modo en que los electrones interactúan en el acoplamiento LS . Las restricciones impuestas sobre los posibles valores de estos números cuánticos para el principio de exclusión son más complicadas pero se pueden determinar como sigue.

Trabajando primero en la aproximación de Hartree, los valores posibles de m_l y m_s se utilizan para determinar los valores posibles de los números cuánticos m_l' , m_s' , m_j' , y de estos se determinan los valores posibles de l' , s' , j' , m_j' . A pesar de que en el acoplamiento LS las componentes x de L' y S' , que están especificadas por m_l' y m_s' , se modifican por las interacciones residual de Coulomb y spin-orbita L' , S' , J' , J_z' no se modifican. Por lo tanto, las restricciones que se encuentran en la aproximación de Hartree tocante a los números cuánticos asociados l' , s' , j' , m_j' , también se aplican al acoplamiento LS .

Como ejemplo se determinarán los números cuánticos del acoplamiento LS que satisfacen el principio de exclusión para dos electrones en la subcapa $2p$. Refiriéndonos a la tabla K-1, se enlistan primero todos los posibles conjuntos de valores de m_l y m_s para los dos electrones, los cuales satisfacen el principio de exclusión. Existen 15 diferentes conjuntos de m_l y m_s para los dos electrones que satisfacen el principio de exclusión, y un número de otros, tales como $m_{l_1} = +1$, $m_{s_1} = +1/2$, $m_{l_2} = +1$, $m_{s_2} = +1/2$, que están excluidas porque lo violan. Para cada conjunto se evalúan los valores correspondientes de los números cuánticos m_l' , m_s' , m_j' a partir de las relaciones $m_l' = m_{l_1} + m_{l_2}$, $m_s' = m_{s_1} + m_{s_2}$, $m_j' = m_l' + m_s'$, que representan las componentes z de las ecuaciones de suma del impulso angular (10-6), (10-8) y (10-10).

Ahora, el problema es identificar los estados cuánticos permitidos especificados en la tabla K-1 en términos de m_l' , m_s' , m_j' , con la especificación de estos estados en términos de l' , s' , j' . Se empieza utilizando (10-14) que representa otros requisitos de conservación del impulso angular. Haciendo

TABLA K-1. Números cuánticos posibles para una configuración np^2 .

Renglón	m_{l_1}	m_{s_1}	m_{l_2}	m_{s_2}	m'_l	m'_s	m'_j
1	+1	+1/2	+1	-1/2	+2	0	+2
2	+1	+1/2	0	+1/2	+1	+1	+2
3	+1	+1/2	0	-1/2	+1	0	+1
4	+1	+1/2	-1	+1/2	0	+1	+1
5	+1	+1/2	-1	-1/2	0	0	0
6	+1	-1/2	0	-1/2	+1	-1	0
7	+1	-1/2	-1	+1/2	0	0	0
8	+1	-1/2	-1	-1/2	0	-1	-1
9	0	+1/2	+1	-1/2	+1	0	+1
10	0	+1/2	0	-1/2	0	0	0
11	0	+1/2	-1	+1/2	-1	+1	0
12	0	+1/2	-1	-1/2	-1	0	-1
13	-1	+1/2	0	-1/2	-1	0	-1
14	-1	+1/2	-1	-1/2	-2	0	-2
15	-1	-1/2	0	-1/2	-1	-1	-2

$l_1 = l_2 = 1$, se encuentra que las combinaciones posibles de l' , s' , j' , expresadas en notación espectroscópica son como sigue 1S_0 , 1P_1 , 1D_2 , 3S_1 , 3P_0 , 3P_1 , 3P_2 , 3D_1 , 3D_2 , 3D_3 . The 3D_3 Los estados 3D_3 se eliminan inmediatamente ya que para estos estados habrá m'_j valores de +3 y -3, pero se ve que no están en listados en la tabla K-1. Puesto que no existen estados 3D_3 , no pueden existir estados 3D_2 ó 3D_1 , todos estos estados K-2 tabla K-1 corresponden a vectores S' y L' de la misma magnitud en el mismo multiplete y aparecen o caen juntos. Ahora, el renglón número 1 en la tabla establece que debe haber estados con $s' \geq 0$ y $l' \geq 2$, ya que $m'_s = -s', \dots, s'$ y $m'_l = -l', \dots, l'$. Estos requisitos se pueden satisfacer sólo por los estados 1D_2 . Existen cinco de esos estados que corresponden a los cinco valores $m'_j = -2, -1, 0, 1, 2$. El renglón número 2 establece que deben existir estados con $s' \geq 1$ y $l' \geq 1$. Esto requiere la presencia de los estados 3P_0 , 3P_1 , 3P_2 . Para 3P_0 existe un estado correspondiente a $m'_j = 0$. Para 3P_1 hay tres estados que corresponden a $m'_j = -1, 0, 1$. Para 3P_2 hay cinco correspondientes a $m'_j = -2, -1, 0, 1, 2$. El número de estados que se han identificado son $5 + 1 + 3 + 5 = 14$. Sólo falta un estado simple y debe ser un estado con $m'_j = 0$ ya que se han utilizado todos los otros valores m'_j de la tabla. Entonces es obvio que éste será el estado cuántico simple 1S_0 .

Se ha encontrado que en la aproximación de Hartree los únicos estados cuánticos posibles para dos electrones con la configuración $2p^2$ son aquellos asociados con los símbolos 1S_0 , 1D_2 , $^3P_{0,1,2}$. Esto es igualmente cierto para una configuración np^2 con cualquier n . Puesto que estas restricciones están expresadas en términos de los números cuánticos l' , s' , j' , también son válidas en el acoplamiento LS . Observe que estos resultados están de acuerdo con los estados presentes observados en el diagrama de niveles de energía del 6C de la figura 10-8.

Como segundo ejemplo considere seis electrones en la misma subcapa p , esto es, considere la configuración np^6 , con cualquier n . La tabla K-2 enlista los estados cuánticos permitidos para este caso en analogía con los enlistados para la configuración np^2 , pero en este caso la tabla sólo tiene un renglón. Obviamente, el renglón es el estado simple 1S_0 . Por supuesto que seis electrones

TABLA K-2. Números cuánticos posibles para una configuración np^6 .

Renglón	m_{i_1}	m_{s_1}	m_{i_2}	m_{s_2}	m_{i_3}	m_{s_3}	m_{i_4}	m_{s_4}	m_{i_5}	m_{s_5}	m_{i_6}	m_{s_6}	m'_1	m'_6	m'_7
1	+1	+1/2	+1	-1/2	0	+1/2	0	-1/2	-1	+1/2	-1	-1/2	0	0	0

representan el número máximo que pueden ocupar una subcapa p . Entonces se concluye que cuando esta subcapa está llena su impulso angular de spin total, su impulso angular orbital total y el impulso angular total son cero. Además, es evidente que se obtendrá la misma conclusión para cualquier subcapa completamente llena. La conclusión queda confirmada por el análisis del espectro óptico de los átomos de los gases nobles. También ocurre que si una subcapa completamente llena no tiene spin neto o impulso angular orbital, no puede existir momento magnético dipolar neto. Esto queda confirmado por los experimentos Stern-Gerlach con átomos de gases nobles.

La Tabla K-3 enlista los estados cuánticos permitidos por el principio de exclusión para algunas configuraciones que contienen varios electrones en la misma subcapa. Cada símbolo proporciona los valores l' y s' de un multiplete permitido. A partir de (10-13) y (10-14) es posible determinar, en términos de l' y s' , todos los valores posibles de j' y m_j' para los estados de este multiplete. Los renglones están dados para configuraciones que van desde ningún electrón en la subcapa hasta el número máximo de electrones consistente con el principio de exclusión. Para cero electrones $l' = s' = j' = 0$, lo cual está descrito por el símbolo 1S_0 . Para un electrón en cualquier subcapa $s' = 1/2$, y los estados permitidos son necesariamente $^2S_{1/2}$, $^6\ ^2P_{1/2,3/2}$. Los estados permitidos

TABLA K-3. Números cuánticos posibles para configuraciones que contienen varios electrones en la misma subcapa.

ns^0	1S				
ns^1		2S			
ns^2	1S				
np^0	1S				
np^1		2P			
np^2	${}^1S, {}^1D$		3P		
np^3		${}^2P, {}^2D$		4S	
np^4	${}^1S, {}^1D$		3P		
np^5		2P			
np^6	1S				
nd^0	1S				
nd^1		2D			
nd^2	${}^1S, {}^1D, {}^1G$		${}^3P, {}^3F$		
nd^3		${}^2D, {}^2P, {}^2D, {}^2F, {}^2G, {}^2H$		${}^4P, {}^4F$	
nd^4	${}^1S, {}^1D, {}^1G, {}^1S, {}^1D, {}^1G, {}^1H, {}^1I$		${}^3P, {}^3F, {}^3P, {}^3D, {}^3F, {}^3G, {}^3H$	5D	
nd^5		${}^2D, {}^2P, {}^2D, {}^2F, {}^2G, {}^2H, {}^2S, {}^2D,$	${}^2F, {}^2G, {}^2I$	${}^4P, {}^4F, {}^4D, {}^4G$	6S
nd^6	${}^1S, {}^1D, {}^1G, {}^1S, {}^1D, {}^1G, {}^1H, {}^1I$		${}^3P, {}^3F, {}^3P, {}^3D, {}^3F, {}^3G, {}^3H$	5D	
nd^7		${}^2D, {}^2P, {}^2D, {}^2F, {}^2G, {}^2H$		${}^4P, {}^4F$	
nd^8	${}^1S, {}^1D, {}^1G$		${}^3P, {}^3F$		
nd^9		2D			
nd^{10}	1S				

para otras configuraciones están determinados por los cálculos de los ejemplos anteriores o por cálculos similares. Los estados permitidos también se pueden obtener de cálculos más elegantes basados en la teoría matemática de los grupos. Es particularmente interesante observar en la tabla K-3 las simetrías alrededor de las configuraciones de subcapa semillena. El número de estados es mayor para esa configuración y los estados para una configuración en la cual una subcapa está llena, excepto por cierto número de electrones son exactamente los mismos que los estados para la configuración en la cual hay justamente este número de electrones en la subcapa. Este resultado también se puede expresar diciendo que los estados permitidos para electrones son los mismos que los estados permitidos para agujeros, un hecho que tiene consecuencias importantes en la física del estado sólido, física nuclear y física atómica. Las simetrías son una demostración contundente del efecto del principio de exclusión ya que, si no fuera por él, el número de estados aumentaría monótonamente conforme aumentara el número de electrones en la subcapa.

Apéndice L

Referencias

Bibliografías incluyendo un comentario breve que caracteriza cada una de ellas.

General

Fundamentals of Modern Physics, por R. Eisberg, Wiley, Nueva York, 1961. (Tratamiento de la mecánica cuántica similar al de este libro, pero más extenso y a un nivel un poco más alto; cobertura de otros tópicos restringidos en esta obra).

Introduction to Modern Physics, por F. Richtmyer, E. Kennard, y J. Cooper (Sexta ed.), McGraw-Hill, Nueva York, 1969. (Comparable en cobertura y nivel a este libro).

Principles of Modern Physics, por N. Ashby y S. Miller, Holden-Day, San Francisco, 1970. (Comparable en cobertura y nivel a este libro).

Introduction to Modern Physics, por J. McGervey, Academic Press, Nueva York, 1971. (Comparable en cobertura a este libro; la mecánica cuántica se trata a un nivel un poco más alto).

Relatividad

Introduction to Special Relativity, por R. Resnick, Wiley, Nueva York, 1968. (Contiene una representación geométrica del espacio-tiempo y un tratamiento accesible de las consecuencias de la relatividad en la teoría electromagnética).

Mecánica Cuántica

Introductory Quantum Mechanics, por V. Rojansky, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, Nueva Jersey, 1938. (Una de las introducciones más claras a la teoría de la mecánica cuántica).

Basic Quantum Mechanics, por K. Ziock, Wiley, Nueva York, 1969. (Un desarrollo breve a un nivel algo más alto que el de este libro).

Espectros atómicos y estructura

Atomic Spectra and Atomic Structure, por G. Herzberg, Dover, Nueva York, 1944. (Principalmente un tratamiento descriptivo).

Atomic Spectra, por H. Kuhn, Academic Press, Nueva York, 1962. (Una discusión detallada de los espectros y su interpretación).

Estadística clásica y cuántica

Statistical and Thermal Physics, por F. Reif, McGraw-Hill, Nueva York, 1965. (Un desarrollo completo del tema).

Espectros moleculares y estructura

Elements of Diatomic Molecular Spectra, por H. Dunford, Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1968. (El tratamiento más elemental y extenso disponible).

Sólidos

Elementary Solids State Physics, por C. Kittel, Wiley, Nueva York, 1962. (Aproximadamente al mismo nivel de este libro pero con una cobertura de los sólidos mucho más amplia).

Physics of Solids, por C. Wert and R. Thomson, McGraw-Hill, Nueva York, 1964. (Orientado hacia la metalurgia).

Núcleos

Introduction to Nuclear Physics, por H. Enge, Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1966. (Una cobertura muy completa del experimento y teoría aproximadamente al mismo nivel que en este libro).

Concepts of Nuclear Physics, por B. Cohen, McGraw-Hill, Nueva York, 1971. (Contiene un tratamiento particularmente completo de los modelos de capas y colectivo aproximadamente al mismo nivel que este libro).

Partículas elementales

Introduction to High Energy Physics, por D. Perkins, Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1972. (Discute los aspectos teórico y experimental de las partículas elementales a un nivel ligeramente superior al de este libro y con mucha mayor amplitud).

Desarrollos recientes en la física cuántica

El estudiante puede enterarse de los desarrollos más recientes en la física cuántica en una forma relativamente fácil leyendo los artículos de divulgación, pero técnicamente adecuados, que aparecen en casi todos los números de las revistas *Physics Today* y *Scientific American*. Están disponibles en la mayoría de las bibliotecas.

Apéndice M

Respuestas a problemas seleccionados

Respuestas para aproximadamente la mitad de aquellos problemas que no están resueltos.

- Capítulo 1: (1) 4830 Å (4) 7.53 W (5a) 4.1×10^9 kg/seg (5b) 6.4×10^{-14} (10b) 281°K (14a) 2.50 (14b) 2.14 (14c) 1.00
- Capítulo 2: (1a) no (1b) 5400 Å (5a) 6.6×10^{-34} joule-seg (5b) 2.3 eV (5c) 5400 Å (10) 3.6×10^{-17} W (12) 1.2×10^{20} Hz, 0.024 Å, 2.7×10^{-22} kg-m/seg (16a) 0.027 Å, 0.057 MeV (16b) 0.060 Å, 0.31 MeV (20) 2.64×10^{-5} Å (25a) 2.02 MeV (25b) 29.6%
- Capítulo 3: (1a) 1.66×10^{-35} m (3a) 3.31×10^{-24} kg-m/seg, 3.31×10^{-24} kg-m/seg (3b) 0.511 MeV, 6.21 keV (3c) 37.6 eV, 6.21 keV (7) 2.5×10^{-17} m $\simeq 10^{-2} \times$ (radio nuclear) (11) $\theta_{\text{fotón}}/\theta_{\text{elect}} = 5.1$ (16a) 3.98×10^2 Å (16b) 3.98×10^6 Å (16c) 3.98×10^{10} Å (22a) ~ 1 eV (22b) ~ 10 MeV (22c) ~ 0.1 MeV (23) $\sim 10^{-3}$ eV
- Capítulo 4: (6) 15.8×10^{-15} m (9a) 4170 cuentas/hr (9b) 11 cuentas/hr (12) $F_{\text{grav}}/F_{\text{elect}} \sim 10^{-40}$ (16) 13.46 eV, 7.18×10^{-27} kg-m/sec, 923 Å, 4.29 m/seg, (19a) 1 (19b) 0.529 Å (19c) 1.05×10^{-34} kg-m²/seg (19d) 1.99×10^{-24} kg-m/seg (19e) 4.14×10^{10} /seg (19f) 2.19×10^6 m/seg (19g) 8.25×10^{-8} nt (19h) 9.07×10^{22} m/seg (19i) 13.6 eV (19j) -27.2 eV (19k) -13.6 eV (25) 4.91 Å (27) 54.4 eV (32) 2.38 Å
- Capítulo 5: (4) $\sqrt{C/mE}/\pi$ (7a) 0.195 (7b) 0.333 (8) 3.4 MeV (10a) $\sqrt{2/a}$ (13a) $1.7\hbar$ (28) 0.4 Å (31) $4.9 v_0$
- Capítulo 6: (9b) 3.05×10^{-5} por protón 2.53×10^{-7} por deuterón (14) $n^2\hbar^2\pi^2/2ma^2$ (17) $4.9 v_0$ (25a) $2.6\hbar$ (28b) $\sim 10^{30}$ (29) ~ 0.1 eV
- Capítulo 7: (3) $E_{\text{He}}:E_{\text{D}}:E_{\text{H}} = 4.0016:1.0013:1$ (7a) $4a_0$ (7b) $5a_0$ (9a) $-\mu e^4/4(4\pi\epsilon_0)^2\hbar^2$ (9b) $-\mu e^4/4(4\pi\epsilon_0)^2\hbar^2$ (16a) $e^{\pm im\varphi}$ (23a) $m\hbar$ (23b) $\overline{L^2} = \overline{L}^2 = (m\hbar)^2$, so $L = m\hbar$
- Capítulo 8: (5a) $(m_l + 2m_s)\mu_B B$ (5c) 4.4×10^4 tesla (10) $j = 7/2; m_j = -7/2, -5/2, -3/2, -1/2, 1/2, 3/2, 5/2, 7/2$; y $j = 5/2; m_j = -5/2, -3/2, -1/2, 1/2, 3/2, 5/2$ (18) $\Delta n = \pm 1, \pm 3, \pm 5, \dots$

- Capítulo 9: (14a) 2.4 (20) probable " " " $7s^15f^{14}6d^9$ (21a) 54 eV (21b) 54 eV (24a) 900 V (24b) 14 Å (26a) $E_K(\text{Fe}) = 7.8 \times 10^3$ eV, $E_K(\text{Co}) = 8.5 \times 10^3$ eV (26b) 8.5×10^3 eV
- Capítulo 10: (4a) $s', l', j' = 1/2, 0, 3/2; 1, 2, 2; 2, 1, 3$ (4b) $^2S_{3/2}$ (14) 12 (18a) 1.4 eV (18b) 2×10^4 tesla (18c) no
- Capítulo 11: (6b) $\nu_m = \nu \sqrt{3N_0/\pi A}$, $\Theta = h\nu/k\sqrt{3N_0/\pi A}$ (10) 6.4×10^9 neut/m³ (12a) 5.1×10^{-3} (12b) 0.32 (22) 3.1 eV (24a) $\hbar^2 \mathcal{N}^2/32l^2m$ (24b) $\mathcal{E}_F/3$
- Capítulo 12: (1) 4.64 eV (4a) $A = 17$ eV, $\rho/R_0 = 1.6$ (10a) 1/73 (10b) 214/1 (13) 2900.8 cm⁻¹, 40 cm⁻¹ (18a) 2.49×10^{14} Hz (18b) 3.65×10^3 nt/m
- Capítulo 13: (4a) metálico (4b) covalente (semi-conductor) (4c) iónico (4d) covalente (aislador) (4e) molecular (6) 10^{10} V/m (10) 3 electrones/átomo (13a) 7.18 eV (13b) sin cambio (21) $\mathcal{E}_g/2$
- Capítulo 14: (9a) 8.3×10^{-5} amp/m (9b) 7.0×10^2 amp/m (12b) 6.8×10^{-5} (14a) 680 tesla (14b) 1.7×10^6 amp/m (14c) 1.2×10^3 joule
- Capítulo 15: (3a) 5.8×10^{-37} MeV (3b) 0.72 MeV (7a) 5.95 MeV (10a) 23.8 MeV (10b) 0.48 MeV (12a) 2.8 MeV (12b) 3.4 F (14a) 7.3 MeV (14b) 14.3 MeV
- Capítulo 16: (4) $(1 - e^{-Rt'})/R$ (7a) 4.0×10^9 yr (7b) 22 g (7c) 1.2×10^{-8} g (9a) 3.9×10^4 m/seg (11a) permitidas, Gamow-Teller (11b) permitida 10^{-6} supresión (11c) permitida Fermi o Gamow-Teller (11d) prohibida, 10^{-3} supresión (20) 78° (23) 3×10^{-5}
- Capítulo 17: (8a) 10 (8b) 33° (12a) 5×10 seg (12b) 1 (12c) 4 (15) $6m_0c^2 = 5360$ MeV (16a) $\sim 10^{-43}$ cm² (16b) $\sim 10^{18}$ cm

Constantes usuales y factores de conversión

Se reportan con el número de cifras significativas utilizadas en el texto.

Velocidad de la luz en el vacío	$c = 2.998 \times 10^8 \text{ m/seg}$
Magnitud de la carga del electrón.	$e = 1.602 \times 10^{-19} \text{ coul}$
Constante de Planck	$h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ joule-seg}$ $\hbar = h/2\pi = 1.055 \times 10^{-34} \text{ joule-seg}$ $= 0.6582 \times 10^{-15} \text{ eV-seg}$
Constante de Boltzmann	$k = 1.381 \times 10^{-23} \text{ joule/}^\circ\text{K}$ $= 8.617 \times 10^{-5} \text{ eV/}^\circ\text{K}$
Número de Avogadro	$N_0 = 6.023 \times 10^{23} / \text{mol}$
Constante en la ley de Coulomb	$1/4\pi\epsilon_0 = 8.988 \times 10^9 \text{ N} \cdot \text{m}^2/\text{coul}^2$
Masa en reposo del electrón	$m_e = 9.109 \times 10^{-31} \text{ kg} = 0.5110 \text{ MeV}/c^2$
Masa en reposo del protón	$m_p = 1.672 \times 10^{-27} \text{ kg} = 938.3 \text{ MeV}/c^2$
Masa en reposo del neutrón	$m_n = 1.675 \times 10^{-27} \text{ kg} = 939.6 \text{ MeV}/c^2$
Unidad de masa atómica ($C^{12} \equiv 12$)	$u = 1.661 \times 10^{-27} \text{ kg} = 931.5 \text{ MeV}/c^2$
Magnetón de Bohr	$\mu_B = eh/2m_e = 9.27 \times 10^{-24} \text{ A} \cdot \text{m}^2 \text{ (o joule/tesla)}$
Magnetón nuclear	$\mu_N = eh/2m_p = 5.05 \times 10^{-27} \text{ A} \cdot \text{m}^2 \text{ (o joule/tesla)}$
Radio de Bohr	$a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/m_e e^2 = 5.29 \times 10^{-11} \text{ m} = 0.529 \text{ Å}$
Energía de Bohr	$E_1 = -m_e e^4 / (4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2 = -2.17 \times 10^{-18} \text{ joule} = -13.6 \text{ eV}$
Longitud de onda de Compton para el electrón	$\lambda_C = h/m_e c = 2.43 \times 10^{-12} \text{ m} = 0.0243 \text{ Å}$
Constante de estructura fina	$\alpha = e^2/4\pi\epsilon_0\hbar c = 7.30 \times 10^{-3} \simeq 1/137$
kT a temperatura ambiente	$k300^\circ\text{K} = 0.0258 \text{ eV} \simeq 1/40 \text{ eV}$
1 eV	$= 1.602 \times 10^{-19} \text{ joule}$
1 Å	$= 10^{-10} \text{ m}$
1 F	$= 10^{-15} \text{ m}$
1 joule	$= 6.242 \times 10^{18} \text{ eV}$
1 barn (bn)	$= 10^{-28} \text{ m}^2$

El objetivo de este libro de texto es presentar un estudio claro y válido de las propiedades de los sistemas cuánticos elementales. La sencillez se logra destacando más la importancia de las aplicaciones de la teoría que la teoría misma. De esta manera, se motiva a los estudiantes a ampliar sus conocimientos teóricos.

Debido a ello, la presente obra se planeó para impartir un curso a estudiantes que ya saben los conceptos elementales del cálculo diferencial e integral y la física clásica.

El libro consta de 17 capítulos, del uno al cuatro se tratan los distintos fenómenos de la física cuántica moderna; los capítulos del cinco al ocho presentan las bases de la mecánica cuántica y sus aplicaciones a los átomos con uno y dos electrones; además, del capítulo nueve en adelante, se exponen varios temas que pueden estudiarse en forma independiente, por ejemplo: Átomos multielectrónicos y moléculas, Estadística cuántica y sólidos, Núcleos y partículas.

En resumen, *Física cuántica* es una valiosa obra muy adecuada para estudiantes del área de fisicomatemáticas, así como para los profesionales que estén interesados en los últimos adelantos de esta ciencia.

$$\Psi = \sum_K \Psi_K$$

$$\Psi = \sum_K \Psi_K$$

$$\Psi = \sum_K \Psi_K$$

ÁREA: FÍSICA

ISBN-10 968-18-0419-8

ISBN-13 978-968-18-0419-0



9 789681 804190

limusa@noriegaeditores.com
www.noriega.com.mx